

# Anwendung finiter Gruppen zur effizienten Berechnung elektromagnetischer Felder in symmetrischen Strukturen auf Basis der Randelementmethode

Vom Fachbereich Elektrotechnik und Informationstechnik  
der Technischen Universität Darmstadt

zur Erlangung  
der Würde eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)  
genehmigte

DISSERTATION

von  
Dipl.-Ing. Denis Sievers  
geboren am 11. Januar 1974 in Aschersleben

Darmstadt 2008

Referent:	Prof. Dr.-Ing. Thomas Weiland
Korreferent:	Prof. Dr.-Ing. Thomas Eibert

Tag der Einreichung:	23. Oktober 2007
Tag der mündlichen Prüfung:	24. Januar 2008



*Meiner lieben Mutter gewidmet.*



# Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theorie Elektromagnetischer Felder des Fachbereiches Elektrotechnik und Informationstechnik der Technischen Universität Darmstadt.

An dieser Stelle möchte ich Herrn Prof. Dr.-Ing. Thomas Weiland für die Aufnahme am Institut für Theorie Elektromagnetischer Felder sowie die Ermöglichung dieses Promotionsvorhabens unter ausgezeichneten Arbeitsbedingungen meinen tiefsten Dank aussprechen.

Ebenso gilt mein Dank Herrn Prof. Dr.-Ing. Thomas Eibert von der Universität Stuttgart für das meiner Arbeit entgegengebrachte Interesse sowie die bereitwillige Übernahme des Korreferates mit allen damit verbundenen Mühen.

Herrn Dr. Igor Zagorodnov danke ich für die Motivation zu dieser interessanten Thematik und die vielen wertvollen Anregungen und Ratschläge. Zudem danke ich Herrn Prof. Dr.-Ing. Rolf Schuhmann und Herrn Dr.-Ing. Wolfgang Ackermann für die wissenschaftliche Betreuung während der Promotion.

Herrn Dipl.-Ing. Felix Wolfheimer danke ich sehr herzlich für die gewissenhafte und kritische Durchsicht des Manuskripts, die immer währende Diskussionsbereitschaft sowie die äußerst angenehme und fruchtbare Zusammenarbeit im Rahmen unserer Lehrtätigkeit.

Meinen Kollegen Herrn Dr.-Ing. Timo Euler und Herrn Dr.-Ing. Andreas Paech möchte ich für das angenehme und freundschaftliche Arbeitsklima in dem Büro, das wir teilten, sowie für die vielen fachlichen Diskussionen aufrichtig danken. Herrn Dipl.-Ing. Lukas Hänichen danke ich für die uneigennützig Unterstützung bei der Übersetzung der Kurzfassung. Frau Heike Seiler sei für ihre stete und unermüdliche Hilfsbereitschaft bei Verwaltungsangelegenheiten und organisatorischen Fragen gedankt.

Besonderer Dank gebührt meiner Mutter und meinen Geschwistern für die fortwährende moralische Unterstützung und den nötigen familiären Rückhalt in dieser Zeit.

Darmstadt, im Januar 2008



# Kurzfassung

In der Praxis sind häufig elektromagnetische Feldprobleme anzutreffen, die durch eine gewisse geometrische Symmetrie gekennzeichnet sind. Bei ihrer numerischen Behandlung ist es im Hinblick auf den damit erzielbaren Rechenvorteil wünschenswert, Redundanzen in der geometrischen Modellbeschreibung und, damit verbunden, in der Rechengebietsgröße zu vermeiden. Auf Basis gruppentheoretischer Methoden ist es bei Vorliegen einer durch eine finite Gruppe charakterisierten Symmetrie möglich, aus einer bestimmten Klasse stammende Randwertaufgaben in mehrere, voneinander unabhängige Teilprobleme zu zerlegen, die auf einem Gebiet reduzierter Größe definiert sind. Dabei muss die Anregung selbst keine symmetrischen Eigenschaften aufweisen. Dieses als nichtkommutative harmonische Analyse bezeichnete Konzept wurde bisher im Rahmen der Randelementmethode nur auf Integralgleichungstypen mit Belegfunktionen, an die keine Stetigkeitsforderungen gestellt sind, angewandt. In der vorliegenden Arbeit wird anhand der Reduktion der elektrischen Feldintegralgleichung mit Fokus auf elektromagnetische Streuprobleme und Eigenwertaufgaben eine Verallgemeinerung dieser Methodik zur Erweiterung ihrer Anwendbarkeit auf Formulierungen mit stetigen Randbelegungen vorgeschlagen.

Ausgehend von der direkten Herleitung gängiger Oberflächenintegralgleichungsformulierungen wird zu Beginn ein als Momentenmethode bekanntes Projektionsverfahren vorgestellt, das im weiteren Verlauf zur approximativen Lösung der elektrischen Feldintegralgleichung dienen soll. In diesem Kontext werden zwei weit verbreitete Techniken zur Regularisierung der in diesem Prozessschritt auftretenden singulären Integrale hinsichtlich Genauigkeit und Effizienz miteinander verglichen und ihr Einfluss auf die Konvergenzeigenschaften des eingesetzten Quadraturverfahrens untersucht. Im Hauptteil der Arbeit wird nach Einführung wichtiger Begriffe und Definitionen aus der Gruppen- und Darstellungstheorie die grundlegende Idee des abstrakten Formalismus der harmonischen Analyse auf finiten Gruppen dargelegt sowie die erforderlichen Voraussetzungen für deren Anwendbarkeit herausgearbeitet. Anschließend wird die Transformation der hier betrachteten Modellgleichung in einen Satz voneinander unabhängiger, strukturgleicher Integralgleichungen demonstriert, dessen Äquivalenz zum Ausgangsproblem jedoch erst durch Vorgabe zusätzlicher Zwangsbedingungen auf den durch die Einschränkung des Rechengebiets entstehenden Schnittträgern herstellbar ist. Zentralen Arbeitsschwerpunkt bildet eine systematische und mathematisch strenge Ableitung dieser von den Stetigkeitseigenschaften der Feldgrößen abhängigen Schnittkantenbedingungen sowie deren Einbindung in den darauf folgenden Diskretisierungsprozess, wozu speziell angepasste Ansatzfunktionen entwickelt werden. Besonderer Wert wird dabei auf eine möglichst allgemein gehaltene Darstellung sowie methodische Vorgehensweise gelegt, damit eine einfache Übertragbarkeit auf weitere Problemformulierungen ohne Schwierigkeiten möglich ist. Aufgrund der erreichten Zerlegung in mehrere, voneinander unabhängige Systeme reduzierter Größe wird im Vergleich zur Lösung des Gesamtproblems sowohl der Speicherplatzbedarf als auch der Rechenaufwand um einen von der zugrunde liegenden Symmetriegruppe abhängigen Faktor, für den entsprechende Abschätzungen angegeben werden, herabgesetzt. Am Beispiel der numerischen Berechnung des Rückstreuquerschnitts der in der Hobbyschiffahrt zum Einsatz kommenden oktaedrischen Radarreflektoren sowie der Eigenwertanalyse eines in der Beschleunigertechnik verwendeten Hohlraumresonators wird die Leistungsfähigkeit und Einsetzbarkeit der vorgestellten Methode verdeutlicht.





# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Motivation . . . . .	1
1.2	Einordnung der Arbeit . . . . .	3
1.3	Zielsetzung . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Randelementmethode</b>	<b>9</b>
2.1	Klassische Elektrodynamik . . . . .	9
2.1.1	Das System der Maxwellschen Gleichungen . . . . .	9
2.1.2	Zusammenhänge auf Oberflächen . . . . .	11
2.1.3	Formulierung im Frequenzbereich . . . . .	12
2.2	Randintegralgleichungsmethode . . . . .	13
2.2.1	Darstellungsformeln für elektromagnetische Felder . . . . .	13
2.2.2	Oberflächenintegralgleichungsformulierungen . . . . .	21
2.3	Diskretisierung von Randintegralgleichungen . . . . .	29
2.3.1	Prinzip der Momentenmethode . . . . .	29
2.3.2	Approximation der Geometrie . . . . .	32
2.3.3	Elektrische Feldintegralgleichung . . . . .	33
2.4	Berechnung der Matrixbeiträge . . . . .	37
2.4.1	Numerische Integration . . . . .	37
2.4.2	Behandlung singulärer Integrale . . . . .	40
2.5	Aspekte bei der Lösung des diskreten Problems . . . . .	49
2.5.1	Elektromagnetische Streuprobleme . . . . .	49
2.5.2	Eigenwertprobleme . . . . .	50
2.6	Bestimmung von Streuquerschnitten . . . . .	51
2.6.1	Begriffsbildung und Definition . . . . .	51

2.6.2	Fernfeldberechnung . . . . .	52
2.6.3	Schnelle Frequenzganganalyse . . . . .	54
<b>3</b>	<b>Finite Symmetriegruppen</b>	<b>59</b>
3.1	Symmetrie und deren Bedeutung in der Praxis . . . . .	59
3.2	Grundlagen und Begriffsdefinitionen . . . . .	61
3.2.1	Symmetrietransformationen . . . . .	61
3.2.2	Gruppen- und Darstellungstheorie . . . . .	68
3.2.3	Gruppenalgebra . . . . .	75
3.3	Zerlegung in Symmetriotypen . . . . .	80
3.3.1	Spektralanalyse der Symmetrieeoperatoren . . . . .	80
3.3.2	Eigenschaften der Projektionsoperatoren . . . . .	85
3.3.3	Abstrakte harmonische Analyse . . . . .	89
<b>4</b>	<b>Symmetriereduktion der elektrischen Feldintegralgleichung</b>	<b>93</b>
4.1	Grundlegendes Konzept . . . . .	93
4.1.1	Separation linearer Operatorgleichungen . . . . .	93
4.1.2	Fundamentalgebiet geometrischer Strukturen . . . . .	96
4.1.3	Geometrische Reduktion . . . . .	98
4.1.4	Symmetrische Anregungen . . . . .	100
4.1.5	Klassifikation von Eigenlösungen . . . . .	104
4.2	Diagonalisierung des Integraloperators . . . . .	111
4.2.1	Reduktion der Integraldarstellungen . . . . .	112
4.2.2	Matrixdarstellung des Integraloperators . . . . .	115
4.3	Bedingungen an den Schnittkanten . . . . .	116
4.3.1	Äquivalente Punktmengen . . . . .	119
4.3.2	Fixpunktmengen . . . . .	120
4.4	Diskretisierung der reduzierten Gleichung . . . . .	124
4.4.1	Basisfunktionen für äquivalente Kanten . . . . .	126
4.4.2	Basisfunktionen für fixe Kanten . . . . .	126
4.4.3	Aufstellung des Gleichungssystems . . . . .	129
4.5	Berechnung der Fernfelddaten . . . . .	132
4.6	Aufwandsabschätzung . . . . .	133

---

4.6.1	Erzeugung der Systemmatrix . . . . .	133
4.6.2	Auswertung des Gleichungssystems . . . . .	135
<b>5</b>	<b>Anwendungsbeispiele</b>	<b>137</b>
5.1	Oktaedrische Radarreflektoren . . . . .	137
5.2	TESLA-Kavität . . . . .	145
<b>6</b>	<b>Ausblick</b>	<b>151</b>
<b>A</b>	<b>Analytische Auswertung spezieller Integrale</b>	<b>153</b>
A.1	Statische Selbstverkopplungsbeiträge . . . . .	153
A.2	Regularisierte Selbstverkopplungsterme . . . . .	158
<b>B</b>	<b>Eigenschaften ausgewählter Punktsymmetriegruppen</b>	<b>163</b>
B.1	Die Gruppe $C_n$ . . . . .	164
B.2	Die Gruppe $C_{nh}$ . . . . .	165
B.3	Die Gruppe $C_{nv}$ . . . . .	167
B.4	Die Gruppe $D_{nh}$ . . . . .	169
B.5	Die Gruppe $O$ . . . . .	171
B.6	Die Gruppe $O_h$ . . . . .	172
<b>C</b>	<b>Oberflächenoperatoren</b>	<b>175</b>
C.1	Vektoranalytische Operatoren . . . . .	175
C.2	Symmetrieoperatoren . . . . .	177
<b>D</b>	<b>Isometrien im Ortsraum</b>	<b>181</b>
	<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>182</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>191</b>
	<b>Lebenslauf</b>	<b>199</b>



# Kapitel 1

## Einleitung

*Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Anwendung gruppentheoretischer Methoden in der Randelementmethode bei Vorliegen geometrischer Symmetrien zur Beschleunigung des numerischen Lösungsprozesses, wozu mit einer Motivation begonnen wird. Der darauf folgende Abschnitt gibt einen kurzen historischen Überblick über die wichtigsten fundamentalen Forschungsarbeiten auf diesem Gebiet, um die Stellung dieser Arbeit aufzuzeigen. Abschließend werden die Ziele sowie die gesetzten Schwerpunkte herausgearbeitet.*

### 1.1 Motivation

Entwicklung, Design und Optimierung technischer Bauteile oder Geräte erfordern eine adäquate Beschreibung der darin ablaufenden physikalischen Prozesse in Form mathematischer Modelle, die aufgrund ihrer hohen Komplexität im Allgemeinen nur unter Zuhilfenahme numerischer Berechnungsmethoden analysiert werden können. Solche Simulationswerkzeuge haben jedoch erst durch die Verfügbarkeit leistungsfähiger Rechenanlagen praktische Bedeutung erlangt und verdrängen immer mehr bisherige Vorgehensweisen, wie zum Beispiel einen aufwändigen und kostspieligen Prototypenbau.

Ein Vertreter numerischer Lösungsverfahren ist die Randelementmethode, die, wie andere Verfahren auch, gewisse Vorzüge aber auch Nachteile besitzt, woraus letztendlich ihre typischen Anwendungsgebiete erwachsen. Da dieser Methode eine äquivalente Oberflächenintegralgleichungsformulierung des zu untersuchenden Problems zugrunde liegt, die mit dem Vorteil einer um Eins verminderten Dimension des Rechengebiets verbunden ist, ist sie insbesondere für Freiraumprobleme prädestiniert. Dem steht, bedingt durch ihren globalen Charakter, der Nachteil dicht besetzter Systemmatrizen gegenüber, der jedoch durch den Einsatz von Matrixkompressionsverfahren ausgeglichen werden kann. Die entscheidende Schwäche liegt jedoch in der Einschränkung auf Materialverteilungen, für die passende GREENsche<sup>1</sup> Funktionen konstruierbar sein müssen. Abgesehen von wenigen Sonderfällen, wie ebene geschichtete Strukturen [32], sind lineare, isotrope und homogene Materialverhältnisse Voraussetzung für die Anwendbarkeit derartiger Verfahren. Aus den genannten Gründen haben sich Randintegralgleichungsverfahren unter anderem in der

---

<sup>1</sup>George Green, 1793–1841, Mathematiker und Physiker

Antennentechnik zur Lösung von Abstrahlungsproblemen, aus der wichtige Eigenschaften von Antennen wie deren Richtcharakteristik ableitbar sind, sowie in der Radartechnik zur Untersuchung von Streukörpern, aus der Kenngrößen wie der Rückstreuquerschnitt bestimmbar sind, etabliert. Aber auch Eigenwertprobleme mit homogenen Resonatorstrukturen, auf die beispielsweise das Aufsuchen von Grenzfrequenzen ausbreitungsfähiger Moden in Wellenleitern oder die Ermittlung von Resonanzfrequenzen einer Beschleunigerstruktur führt, können mit diesen Verfahren behandelt werden. Dem letztgenannten Anwendungsbereich wird jedoch aufgrund des Mangels an effizienten Verfahren zur Lösung der diskreten Eigenwertgleichung derzeit noch wenig Beachtung geschenkt.

Die ständig wachsenden Designanforderungen, wie hoher Miniaturisierungsgrad und hohe Funktionalität, führen notwendigerweise zu immer vielschichtigeren und komplizierteren Systemmodellen, wodurch die Ansprüche an numerischen Simulationsalgorithmen gleichermaßen stetig steigen. Um die gewünschten Ergebnisse mit hinreichender Genauigkeit, vertretbarem Zeitaufwand und den zur Verfügung stehenden, meist beschränkten Rechenressourcen bereitstellen zu können, ist die fortwährende Verbesserung bestehender Verfahren oder die Entwicklung neuer, effizienter und vor allem universell einsetzbarer Algorithmen und Implementierungen unabdingbar. Dazu gehört unter anderem auch die vorteilhafte Ausnutzung bestimmter Systemeigenschaften in der Modellierungsphase, wodurch mögliche Redundanzen im Systemmodell vermieden werden können und damit eine Beschleunigung des Lösungsprozesses erreichbar ist. Lässt sich zum Beispiel der Geometrie, den Materialverhältnissen sowie der Quellverteilung eines elektromagnetischen Feldproblems eine gewisse Symmetrie zuschreiben, so besagt das VON NEUMANNsche<sup>2</sup> Prinzip, dass sämtliche Feldgrößen die gleichen Symmetrieeigenschaften besitzen [13]. Als Konsequenz daraus reicht die Betrachtung eines passenden Teilgebiets aus, womit der numerische Aufwand bei der Lösungsfindung entsprechend sinkt. Bei einer beliebigen Anregung wird jedoch die gesuchte Feldlösung nicht mehr symmetrisch sein, so dass sich unweigerlich die Frage stellt, wie trotzdem eine mögliche Symmetrie der geometrischen Struktur vorteilhaft ausgenutzt werden kann. Es liegt auf der Hand, dass eine intuitive Herangehensweise nur in sehr einfachen Fällen, wie beispielsweise bei Vorliegen einer Spiegelsymmetrie, zum Ziel führt. Für die Ausnutzung höherer Symmetrien ist hingegen ein strenges und systematisches Vorgehen unumgänglich, wofür die benötigten mathematischen Werkzeuge von der Gruppen- und Darstellungstheorie geliefert werden. Diese ermöglichen auch bei unsymmetrischer Randwertvorgabe und beliebiger Anregung die Zerlegung eines Randwertproblems in mehrere, voneinander unabhängige Teilprobleme reduzierter Größe, die folgende Vorteile bei einer numerischen Behandlung mit sich bringt:

- Sowohl der Rechenzeitbedarf als auch der Speicheraufwand eines numerischen Feldberechnungsverfahrens, dessen asymptotische Komplexitätsordnung größer als Eins ist, wird um einen von der zugrunde liegenden Symmetrie abhängigen Faktor herabgesetzt. Besitzt zusätzlich die Anregung eine gewisse Symmetrie, verringert sich zudem die Anzahl der zu lösenden Teilprobleme, wodurch sich die erzielbaren Reduktionsfaktoren weiter erhöhen.
- Durch eine geometrische Symmetrie hervorgerufene entartete Eigenzustände eines linearen Operators werden durch den Reduktionsprozess ebenfalls aufgespalten. Wenn

---

<sup>2</sup>John von Neumann, 1903–1957, Mathematiker, Physiker und Chemie-Ingenieur

andere Ursachen für eine Entartung ausgeschlossen sind, besitzen die Operatoren, welche die reduzierten Probleme beschreiben, folglich nur noch einfache Eigenwerte. Bei der numerischen Behandlung von Eigenwertproblemen können somit auch Schwierigkeiten, die eine Entartung von Eigenlösungen mit sich bringen, umgangen werden.

- Die Aufspaltung eines Systems in mehrere Teilsysteme ist gewöhnlich mit einer Verbesserung der Konditionsverhältnisse verbunden [80], die sich auch auf die diskreten Gegenstücke überträgt. Verbesserte Konditionszahlen der Systemmatrizen wirken sich vorteilhaft auf das Konvergenzverhalten iterativer Lösungsstrategien aus.

Es ist zu beachten, dass die Symmetrie sowohl der Materialverteilung als auch des Typs der Randbedingung weiterhin vorausgesetzt sein muss.

## 1.2 Einordnung der Arbeit

Gruppentheoretische Methoden werden schon seit langer Zeit in vielen naturwissenschaftlichen Disziplinen, wie beispielsweise in der Kristallografie, Chemie und vor allem in der Quantenmechanik zur Analyse von Objekten und Systemen mit bestimmten Symmetrieeigenschaften eingesetzt. Eine gruppentheoretische Behandlung linearer Gleichungssysteme, die aus einer Diskretisierung von partiellen Differentialgleichungen mittels der Methode der finiten Elemente (FEM) oder der Methode der finiten Differenzen (FDM) entstehen, erfolgte erstmalig im Jahr 1976 von STIEFEL und FÄSSLER, womit der Grundstein für die Ausnutzung geometrischer Symmetrien in der numerischen Feldberechnung gelegt wurde [36, 80]. Die Idee besteht in der Verwendung einer *symmetrieadaptierten Basis* für den Ansatzraum, die eine Darstellung des diskretisierten Operators in Blockdiagonalgestalt ermöglicht. Neben der Anwendung auf Randwertprobleme mit geometrischer Symmetrie wurde auch eine Erweiterung dieser Methode auf nahezu symmetrische Strukturen vorgeschlagen. Weiterführende Arbeiten zu diesem Verfahren mit schwerpunktmäßiger Anwendung im ingenieurwissenschaftlichen Bereich wurden in den darauffolgenden Jahren vorgestellt [47, 45, 46, 12, 60]. Eine rechentechnische Umsetzung dieser Methode erfordert die automatisierte Konstruktion einer symmetrieadaptierten Basis, auf deren programmiertechnische Umsetzbarkeit jedoch nicht eingegangen wurde. Aus diesem Grund konnte sich dieses Konzept in der angewandten Feldberechnung nicht durchsetzen, es gab jedoch zweifellos den Anstoß für weitere Lösungsansätze.

Eine vollkommen andere Vorgehensweise schlug BOSSAVIT Mitte der achtziger Jahre vor, bei der im Unterschied zur Dekomposition des diskretisierten Gesamtproblems zuerst die kontinuierliche Randwertaufgabe durch *Projektion auf invariante Unterräume* in einen dazu äquivalenten Satz voneinander unabhängige, auf einem als Symmetriezone bezeichneten Teilgebiet des ursprünglichen Rechengebiets definierte Ersatzprobleme überführt wird, welche anschließend einem Diskretisierungsprozess unterzogen werden [16, 17, 18]. Kernstück dieser Methode bilden Projektoren, die auf einfache Weise aus den Darstellungen der die Symmetrie des Rechengebiets beschreibenden Gruppe konstruierbar sind. Im Mittelpunkt der Anwendung standen dabei Variationsformulierungen der typischen Randwertaufgaben aus der theoretischen Elektrotechnik und Mechanik, die mittels der

Methode der finiten Elemente gelöst werden. Besondere Aufmerksamkeit wurde der Frage nach den zu stellenden Bedingungen auf dem Schnitttrand des Fundamentalgebietes, der durch die geometrische Reduktion des Rechengebietes verursacht wird, und deren Einarbeitung in das Diskretisierungsverfahren gewidmet. Die vorgestellten Lösungsansätze waren jedoch speziell auf eine FEM-Formulierung zugeschnitten und können nicht unmittelbar in die Randelementmethode übernommen werden. Vor allem die Berücksichtigung einer derartigen Bedingung bei der Diskretisierung wurde nur anhand eines einfachen Beispiels in heuristischer Weise demonstriert, die keine flexible Umsetzung in ein Rechenschema zulässt.

Unabhängig davon entwickelten TARASOV, ZAGORODNOV und Mitarbeiter Anfang der neunziger Jahre ein abstraktes Verfahren, in dem gleichfalls das *Prinzip der Symmetriezellenreduktion*, jedoch auf Grundlage einer äquivalenten gruppenalgebraischen Repräsentation des Randwertproblems umgesetzt wurde [85, 86, 102]. Durch eine geeignete Zerlegung des als symmetrisch angenommenen Trägers der involvierten Feldgrößen lässt sich eine lineare, äquivariante Operatorgleichung rein formal als ein Faltungsprodukt auf finiten Gruppen ausdrücken, das nach Anwendung einer verallgemeinerten Variante der FOURIER<sup>3</sup>-Transformation in ein punktweises Produkt transformiert werden kann. Der gesamte Vorgang wird als nichtkommutative harmonische Analyse bezeichnet und führt im Ergebnis auf eine ähnliche Formulierung wie die Anwendung der zuvor erwähnten Projektionsmethode. Dieses Verfahren wurde bisher auf akustische und elektromagnetische Streuprobleme angewendet, die durch Randintegralgleichungen mit stark singulärem oder hypersingulärem Kern modelliert werden. Da keine Stetigkeitsanforderungen an die Belegfunktion derartiger Integralgleichungen zu stellen sind, waren keine Schnittkantenbedingungen zu beachten. Zwar wurde diese Problematik später in [96] im Zusammenhang mit der Reduktion der MAXWELLSchen<sup>4</sup> Gleichungen und deren Diskretisierung auf Basis der von WEILAND im Jahr 1977 vorgeschlagenen Methode der finiten Integration (FIT) [95] diskutiert, eine allgemein gültige Ableitung sowie die Realisierung dieser Bedingung auf einer Rechanlage wurden jedoch auch hier nicht angegeben. Vorschläge für Methodiken zur Behandlung von Streuproblemen mit gestörter Symmetrie und zur Berücksichtigung möglicher Symmetrien der anregenden Welle gaben weitere wichtige Impulse in der Weiterentwicklung solcher Verfahren [99, 103, 87, 105, 104, 101, 100, 99].

Zu etwa der gleichen Zeit wurde von GEORG, ALLGOWER, TAUSCH und Mitarbeitern ein ebenfalls auf algebraischer Ebene arbeitendes Reduktionsverfahren vorgestellt, für das aber im Gegensatz zur erstgenannten Vorgehensweise keine explizite Kenntnis einer symmetriangepassten Basis notwendig ist, so dass die damit sonst verbundenen Schwierigkeiten umgangen wurden [37, 4]. Das Prinzip der von den Autoren als *Symmetriereduktionsmethode* bezeichneten Verfahrensweise beruht auf einer symmetrieerhaltenden Diskretisierung des kontinuierlichen Operators mit dem Ziel, dessen vorausgesetzte Äquivarianz auf sein diskretes Gegenstück zu übertragen. Die verallgemeinerte FOURIER-Transformation der äquivarianten Matrix, die als ein diskretes Faltungsprodukt im allgemeineren Sinn aufgefasst werden kann, resultiert schließlich in einer Matrix mit Blockdiagonalgestalt, womit das ursprüngliche diskrete Problem in mehrere unabhängige Teilprobleme zerfällt. Diese Methode wurde erfolgreich zur Vereinfachung von Randintegralgleichungen mit skalarwertigen Belegfunktionen, die im Zuge der Diskretisierung durch stückweise konstan-

<sup>3</sup>Jean Baptiste Joseph Fourier, 1768–1830, französischer Mathematiker und Physiker

<sup>4</sup>James Clerk Maxwell, 1831–1879, schottischer Physiker



te Funktionen approximiert wurden, eingesetzt. Die Verwendung von Ansatzfunktionen höherer Ordnung führte jedoch bei der gruppentheoretischen Beschreibung der diskreten Probleme auf Systeme mit sogenannten Fixpunkten, die eine Erweiterung des Verfahrens erforderlich machten [11, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 38, 90]. Des Weiteren wurde die Konstruktion äquivarianter Vorkonditionierer auf Basis der Symmetriereduktionsmethode für Randwertaufgaben mit einer gestörten geometrischen Symmetrie vorgeschlagen [89].

Auf die Vielzahl weiterer Publikationen zu dieser Thematik, wie zum Beispiel [61, 15, 79, 2, 3], die entweder auf den genannten grundlegenden Arbeiten aufbauen oder identische Konzepte verfolgen, soll an dieser Stelle nicht näher eingegangen werden.

Genau wie bei der Methode der symmetrieangepassten Basis liegt auch bei der Symmetriereduktionsmethode das Konzept der algebraischen Reduktion zugrunde. Da bei der Symmetriereduktionsmethode eine derartige Basis implizit generiert wird, kann sie folglich als Weiterentwicklung angesehen werden. Sowohl die Projektionsmethode als auch die nichtkommutative harmonische Analyse bauen dagegen auf dem Grundgedanken der Symmetriezellenreduktion auf, so dass auch in diesem Fall von einer konzeptionellen Übereinstimmung beider Verfahren gesprochen werden kann. Damit lassen sich zwei grundsätzliche Vorgehensweisen erkennen, die in Abbildung 1.1 verdeutlicht sind.

Algebraische Symmetriereduktionsverfahren besitzen den Vorzug der einfachen Einbindung in ein bereits bestehendes Diskretisierungsverfahren, da der lineare Operator erst nach der Diskretisierung durch eine Transformation in Blockdiagonalgestalt verändert wird. Notwendige Voraussetzung dafür ist allerdings ein symmetriegerechtes Rechengitter, woraus ein entscheidender Nachteil dieses Konzepts entsteht. Auch wenn die Entwicklung effizienter Algorithmen und Implementierungen zur Erzeugung derartiger Gitter stetig vorangetrieben wird [1, 68], verbleibt weiterhin die unvermeidbare Redundanz bei der Repräsentation des geometrischen Modells. Demgegenüber steht jedoch der immense Vorteil der Verfügbarkeit sehr effizienter Implementierungen zur Durchführung der verallgemeinerten FOURIER-Transformation, wofür sogar spezielle Beschleunigungstechniken konzipiert wurden [74]. Nachteilig ist jedoch, dass zu diesem Zweck ein Teil der ursprünglichen Systemmatrix permanent verfügbar sein muss, was mit einem zusätzlichen Speicheraufwand verbunden ist. Methoden der Symmetriezellenreduktion vermeiden die erwähnten Nachteile, da das zu lösende Randwertproblem auf einem reduzierten Rechengebiet definiert ist. Dies geht jedoch mit einer Modifikation des problembeschreibenden Operators einher, weshalb das einzusetzende Diskretisierungsverfahren, nicht zuletzt auch wegen der zusätzlichen Einbindung spezieller Basisfunktionen an den Schnittträgern der Symmetriezelle, entsprechend angepasst werden muss.

Die in Abbildung 1.1 gezeigten Strategien unterscheiden sich lediglich in der Reihenfolge der beiden, aus Separation und Diskretisierung bestehenden Prozessschritte, wodurch sich die erwähnten Vorzüge und Nachteile bei einer praktischen Umsetzung auf einer Rechenanlage ergeben. Wenn eine gleichartige Diskretisierung gewählt wird, die sowohl ein bezüglich der Symmetriezelle identisches Rechengitter als auch Ansatzfunktionen gleicher Ordnung umfasst, dann sind beide reduzierten diskreten Probleme vollkommen äquivalent zueinander. Das Problem der Schnitttrandbedingungen findet dabei sein Pendant in der numerischen Behandlung von Fixpunkten, womit die enge Verwandtschaft zwischen diesen beiden Strategien deutlich hervortritt.

Trotz der bisher erzielten großen Fortschritte auf dem Gebiet der Symmetriereduktion

Symmetriereduktionsmethode  
(algebraische Reduktion)

Methode der  
Symmetriezellenreduktion

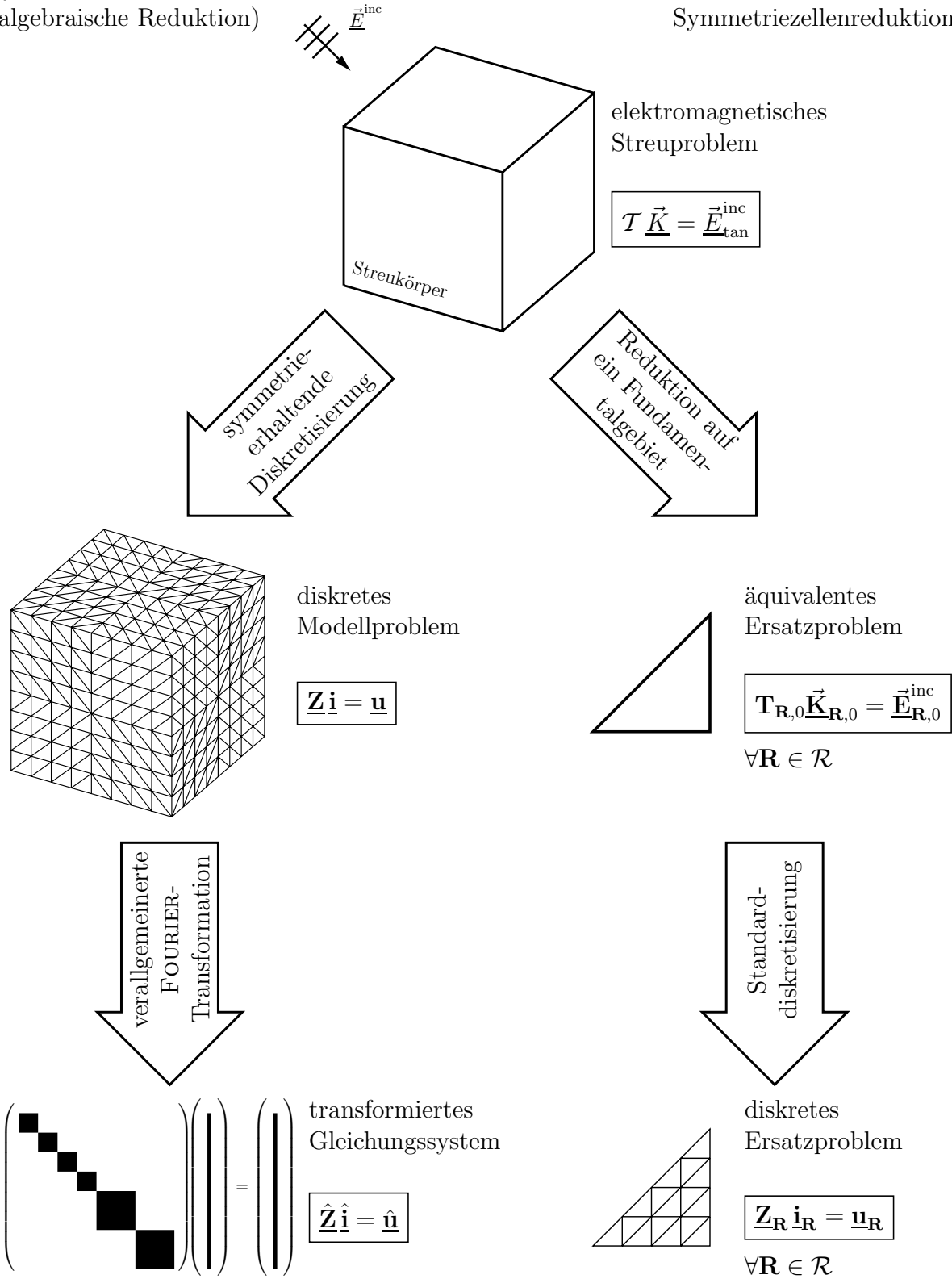


Abbildung 1.1: Prinzipielle Strategien zur Ausnutzung geometrischer Symmetrien in der numerischen Feldberechnung. Bei einer gleichartigen Diskretisierung sind die aus beiden Vorgehensweisen resultierenden Modellgleichungen vollkommen äquivalent zueinander.

besteht immer noch weiterer Forschungsbedarf, um die im historischen Abriss aufgezeigten Lücken in der Theorie, vor allem aber in der praktischen Ingenieursanwendung zu schließen. So wurde bisher weder die algebraische Variante für vektorwertige Randwertprobleme eingesetzt noch ist die Frage nach den zu stellenden Schnitttrandbedingungen bei Verwendung des Konzepts der Symmetriezellenreduktion insbesondere in der Randelementmethode zufriedenstellend beantwortet worden. Die vorliegende Arbeit knüpft unmittelbar an die aktuellen Forschungsergebnisse von ZAGORODNOV [99] an und erweitert das Anwendungsspektrum um weitere, in der Elektrodynamik gebräuchliche Randintegralgleichungsformulierungen.

## 1.3 Zielsetzung

Das Konzept der Symmetriezellenreduktion zur vorteilhaften Ausnutzung geometrischer Symmetrien wurde im Rahmen der Randelementmethode bisher erfolgreich für Integralgleichungen umgesetzt, deren Belegfunktionen keinen Stetigkeitsanforderungen unterliegen. Auf viele in der Rechenpraxis verwendete Formulierungen trifft diese Annahme jedoch nicht zu, womit sie diesem Verfahren nicht zugänglich sind. Ziel der vorliegenden Arbeit ist deshalb eine Weiterentwicklung dieser Methodik, um deren Anwendbarkeit auf Integralgleichungen mit stetigen Randbelegungen zu ermöglichen.

Im Mittelpunkt dieser Abhandlung steht die Vorstellung der harmonischen Analyse auf finiten Gruppen zur Separation linearer, äquivarianter Operatorgleichungen und deren konkrete Realisierung in der Randelementmethode. Dabei ist das Hauptaugenmerk auf elektromagnetische Streuprobleme und Eigenwertaufgaben mit ideal elektrisch leitfähigen Strukturen gerichtet, die durch die elektrische Feldintegralgleichung im Frequenzbereich modelliert sein sollen. Im Hinblick auf eine möglichst einfache numerische Behandlung soll eine zum Ausgangsproblem strukturell gleiche Formulierung des reduzierten Randwertproblems angestrebt werden. Den thematischen Schwerpunkt bildet die systematische und mathematisch strenge Ableitung der Schnittkantenbedingung für beliebige flächenhafte Rechengebiete sowie deren Integration im Rahmen der Momentenmethode mit Fokus auf eine einfache und universelle Umsetzbarkeit in ein Rechenschema. Die sich daraus ergebenden Rechenvorteile sollen theoretisch analysiert und anhand praxisnaher Beispiele aus den genannten Anwendungsbereichen verifiziert werden. Weiterhin soll die Verbindung zur Symmetriereduktionsmethode auf diskreter Ebene hergestellt werden, um so die Möglichkeit zu eröffnen, bestimmte Vorzüge der algebraischen Formulierung auszunutzen, ohne eine symmetriegerechte Diskretisierung der gesamten Struktur vornehmen zu müssen. Um eine einfache Übertragung auf weitere Integralgleichungsformulierungen sowie eine einfache Umsetzbarkeit dieses abstrakten Formalismus in der Rechenpraxis zu gewährleisten, soll besonderer Wert auf eine allgemein gültige Betrachtungsweise und methodische Vorgehensweise gelegt werden.

Bei der Erzeugung der Systemmatrix stößt man in der Randelementmethode unweigerlich auf singuläre Integrale, deren numerische Auswertung eine besondere Herausforderung darstellt. In diesem Kontext sollen bestehende Regularisierungstechniken hinsichtlich ihrer Effizienz und Praxistauglichkeit miteinander verglichen und bezüglich ihres Einflusses auf das Konvergenzverhalten des eingesetzten Quadraturverfahrens genauer untersucht werden.



# Kapitel 2

## Randelementmethode

*Eine kurze Einführung in die Grundlagen der klassischen Elektrodynamik, deren Ausgangspunkt das System der Maxwellschen Gleichungen in Verbindung mit den Materialbeziehungen ist, wird im ersten Abschnitt dieses Kapitels gegeben, wobei der Fokus auf spezielle Zusammenhänge und Formulierungen, die im weiteren Verlauf der Arbeit benötigt werden, gerichtet ist. Die sich anschließenden Abschnitte umfassen die äquivalente Formulierung elektrodynamischer Problemstellungen als Randintegralgleichung sowie deren Diskretisierung mit Hilfe eines als Momentenmethode bezeichneten, allgemeinen Projektionsverfahrens zur Lösung linearer Operatorgleichungen. In seiner Gesamtheit bildet dieser zweistufige Prozess die Randelementmethode. Eine besondere Herausforderung stellt die für die Generierung der Systemmatrizen unvermeidbare numerische Auswertung singulärer Integrale dar, wofür verschiedene Regularisierungstechniken vorgestellt und im Hinblick auf ihre Leistungsfähigkeit und ihren Einfluss auf das Konvergenzverhalten des verwendeten Quadraturverfahrens miteinander verglichen werden. Gegenstand des letzten Abschnittes ist die Extraktion von Fernfelddaten aus der Lösung der diskreten Integralgleichung bei der Untersuchung elektromagnetischer Streuprobleme, woraus wichtige Zielgrößen wie der Radarquerschnitt des betrachteten Streuobjekts bestimmbar sind.*

### 2.1 Klassische Elektrodynamik

#### 2.1.1 Das System der Maxwellschen Gleichungen

Die Grundpfeiler zur mathematischen Beschreibung der in der Natur auftretenden und beobachtbaren elektrodynamischen Prozesse und Phänomene bilden aus klassischer Sichtweise die MAXWELLSchen Gleichungen, die das Ergebnis der bahnbrechenden Arbeiten von James Clerk Maxwell sind. Zur vollständigen Erfassung derartiger Vorgänge werden die Feldstärke  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  und die Verschiebungsflussdichte  $\vec{D}(\vec{r}, t)$  als elektrische Feldgrößen, die Feldstärke  $\vec{H}(\vec{r}, t)$  und die Flussdichte  $\vec{B}(\vec{r}, t)$  als magnetische Feldgrößen sowie die elektrische Stromdichte  $\vec{J}(\vec{r}, t)$  und die Raumladungsdichte  $\rho(\vec{r}, t)$  als Quellen eingeführt. Die MAXWELLSchen Gleichungen verknüpfen diese sowohl vom Ort als auch von der Zeit abhängigen Skalar- und Vektorfelder miteinander und lauten für den Fall ruhender Medien

und unter Zugrundelegung eines Rechtssystems in integraler Form:

$$\int_{\partial S} \vec{E} \cdot \vec{t} dl = - \int_S \partial_t \vec{B} \cdot \vec{n} dA, \quad \forall S \subset D_0, \quad (2.1.1a)$$

$$\int_{\partial S} \vec{H} \cdot \vec{t} dl = \int_S (\partial_t \vec{D} + \vec{J}) \cdot \vec{n} dA, \quad \forall S \subset D_0, \quad (2.1.1b)$$

$$\int_{\partial D} \vec{D} \cdot \vec{n} dA = \int_D \varrho dV, \quad \forall D \subseteq D_0, \quad (2.1.1c)$$

$$\int_{\partial D} \vec{B} \cdot \vec{n} dA = 0, \quad \forall D \subseteq D_0. \quad (2.1.1d)$$

Gleichung (2.1.1a) wird als Induktionsgesetz oder nach ihrem Urheber auch als FARADAYSches<sup>1</sup> Gesetz bezeichnet und ist für jedes beliebige, einfach zusammenhängende Flächenstück  $S$  gültig. Entsprechend ist Gleichung (2.1.1b) als Durchflutungsgesetz oder auch als AMPÈRESches<sup>2</sup> Gesetz bekannt und muss für jedes einfach zusammenhängende, räumliche Teilgebiet  $D$  des Rechengebiets  $D_0$  erfüllt sein.

Beim Übergang zu infinitesimal kleinen Flächen und Volumina lässt sich mit Hilfe der Grenzwertdefinitionen für die räumlichen Differentialoperatoren aus der integralen Darstellung unter bestimmten Stetigkeitsvoraussetzungen eine äquivalente differentielle Form ableiten:

$$\text{rot } \vec{E} = -\partial_t \vec{B}, \quad (2.1.2a)$$

$$\text{rot } \vec{H} = \partial_t \vec{D} + \vec{J}, \quad (2.1.2b)$$

$$\text{div } \vec{D} = \varrho, \quad (2.1.2c)$$

$$\text{div } \vec{B} = 0. \quad (2.1.2d)$$

Abgeschlossen wird dieses mathematische Modell durch die noch fehlenden Zusammenhänge zwischen den Feldstärken und den Flussdichten, die im Vakuum linear sind und durch die konstante Permeabilität  $\varepsilon_0$  und Permittivität  $\mu_0$  als Proportionalitätsfaktoren ausgedrückt werden können. Bei Vorhandensein von Materie kann deren Wechselwirkung mit den elektromagnetischen Feldern vom makroskopischen Standpunkt aus durch Erweiterung dieser Beziehungen um eine Polarisation  $\vec{P}_{\text{el}}$  sowie Magnetisierung  $\vec{M}_{\text{mag}}$

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}_{\text{el}}, \quad (2.1.3a)$$

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}_{\text{mag}}) \quad (2.1.3b)$$

in allgemeiner Weise berücksichtigt werden. Die Bestimmung der Abhängigkeiten der Polarisation und Magnetisierung von den Feldstärken setzt eine angemessene Modellierung der elektrischen und magnetischen Eigenschaften des betreffenden Mediums voraus, wofür beispielsweise Materialmodelle auf atomarer oder molekularer Ebene herangezogen werden können.

<sup>1</sup>Michael Faraday, 1791–1867, englischer Physiker und Chemiker

<sup>2</sup>André-Marie Ampère, 1775–1836, französischer Physiker und Mathematiker

Die in den Gleichungen (2.1.1c) und (2.1.2c) auftretende Raumladungsdichte repräsentiert die Gesamtheit der freien Ladungen im Rechengebiet. Die durch Polarisierungseffekte hervorgerufene, an die Materie gebundene Ladungsverteilung ist bereits implizit in der Materialgleichung (2.1.3a) enthalten. Ebenso ist die Stromdichte in den Gleichungen (2.1.1b) und (2.1.2b) als eine durch freie Ladungen erzeugte Strömung anzusehen, die an das Material gebundenen Magnetisierungsströme sind in Gleichung (2.1.3b) erfasst. Abhängig von den physikalisch relevanten Effekten und den Modellannahmen kann sich die Stromdichte der ungebundenen Ladungen aus mehreren additiven Anteilen zusammensetzen:

- Die *Leitungsstromdichte*  $\vec{J}_l = \kappa \vec{E}$  dominiert in elektrisch guten Leitern und wird durch die frei beweglichen Elektronen verursacht. Für kleine Feldstärken hängt diese nahezu linear von der elektrischen Feldstärke mit der Leitfähigkeit  $\kappa$  als Proportionalitätsfaktor ab.
- Eine mit der Geschwindigkeit  $\vec{v}$  driftende Ladungsverteilung  $\rho$  ruft die *Konvektionsstromdichte*  $\vec{J}_k = \rho \vec{v}$  hervor. Dieses Modell findet beispielsweise in der Beschleunigertechnik Anwendung.
- Wenn Quellverteilungen bekannt sind und nicht von den sie umgebenden Feldern beeinflusst werden, können diese vereinfacht als *eingeprägte Stromdichte*  $\vec{J}_e$  angenommen werden.
- In Halbleiterwerkstoffen tritt unter anderem der Effekt der Diffusion stark in Erscheinung. Dieses infolge von Konzentrationsunterschieden elektrisch geladener, frei beweglicher Teilchen auftretende physikalische Phänomen lässt sich als *Diffusionsstromdichte*  $\vec{J}_d = -D(\text{grad } \rho)$  mit der Diffusionskonstanten  $D$  mathematisch beschreiben.

Neben diesen bekanntesten Vertretern können auch andere Effekte zu elektrischen Strömungen führen, die, wenn sie nicht vernachlässigbar sind, passend modelliert und in die MAXWELLSchen Gleichungen einbezogen werden müssen.

Um ein wohlgestelltes mathematisches Problem zu erhalten, sind einerseits passende, von den physikalischen Gegebenheiten abhängige Funktionenräume zu wählen und andererseits entsprechende Bedingungen an den Grenzen des Rechengebiets sowie sinnvolle Anfangswerte für die Feldgrößen vorzugeben. Weiterhin müssen die Quellverteilungen zur Sicherstellung der Existenz einer Lösung des MAXWELLSchen Gleichungssystems der Kontinuitätsgleichung

$$\text{div } \vec{J} + \partial_t \rho = 0 \quad (2.1.4)$$

genügen, die aus dem Durchflutungsgesetz ableitbar ist und das physikalische Grundprinzip der Ladungserhaltung zum Ausdruck bringt.

Für eine ausführliche und vertiefende Behandlung der klassischen Feldtheorie seien die Lehrbücher von LEHNER [59] und HENKE [52] sowie die weiterführenden Monografien von JACKSON [56] und ROTHWELL [75] empfohlen.

### 2.1.2 Zusammenhänge auf Oberflächen

Für direkte Randintegralgleichungsverfahren sind Zusammenhänge von elektromagnetischen Feldgrößen auf Rändern von Teilgebieten des dreidimensionalen euklidischen Raums

von enormer Wichtigkeit, weshalb diese im Folgenden kurz vorgestellt werden.

Bezeichnet  $S$  eine geschlossene, glatte Oberfläche, deren Orientierung durch den senkrecht auf ihr stehenden, nach außen gerichteten Normaleneinheitsvektor  $\vec{n}$  charakterisiert ist, so folgt aus dem Induktionsgesetz (2.1.2a) und dem Durchflutungsgesetz (2.1.2b)<sup>3</sup>:

$$\text{Div}(\vec{H} \times \vec{n})(\vec{r}) = (\partial_t \vec{D} \cdot \vec{n})(\vec{r}) + (\vec{J} \cdot \vec{n})(\vec{r}), \quad \vec{r} \in S, \quad (2.1.5a)$$

$$\text{Div}(\vec{E} \times \vec{n})(\vec{r}) = -(\partial_t \vec{B} \cdot \vec{n})(\vec{r}), \quad \vec{r} \in S. \quad (2.1.5b)$$

Es wurde dabei vorausgesetzt, dass die elektromagnetischen Felder stetig durch die Fläche verlaufen, womit die Funktionswerte auf der Oberfläche wohldefiniert sind. Falls die betrachteten Komponenten beim Durchgang durch die Fläche einen Sprung aufweisen, sind die abgeleiteten Beziehungen als Grenzwerte aufzufassen. In diesem Fall liefert die Bildung der Differenz beider Grenzwerte unter Einbeziehung der bekannten Sprungbedingungen für die Feldgrößen bei Vorhandensein von elektrischen Flächenladungsdichten  $\sigma$  und Flächenstromdichten  $\vec{K}$  sowie fiktiven magnetischen Flächenladungsdichten  $\eta$  und Flächenstromdichten  $\vec{M}$ <sup>4</sup>

$$\vec{n} \cdot (\tau_n^- \vec{D} - \tau_n^+ \vec{D}) = \sigma, \quad \vec{n} \times (\tau_n^- \vec{E} - \tau_n^+ \vec{E}) = -\vec{M}, \quad (2.1.6a)$$

$$\vec{n} \cdot (\tau_n^- \vec{B} - \tau_n^+ \vec{B}) = \eta, \quad \vec{n} \times (\tau_n^- \vec{H} - \tau_n^+ \vec{H}) = \vec{K}. \quad (2.1.6b)$$

die Kontinuitätsgleichungen für flächenhafte Quellverteilungen:

$$\text{Div} \vec{K} + \partial_t \sigma = -\vec{n} \cdot (\tau_n^- \vec{J} - \tau_n^+ \vec{J}), \quad (2.1.7a)$$

$$\text{Div} \vec{M} + \partial_t \eta = 0. \quad (2.1.7b)$$

Elektrische Flächenladungen und -ströme sind idealisierte mathematische Modellgrößen, die beispielsweise auf der Oberfläche ideal elektrisch leitfähiger Körper auftreten. Magnetische Ladungen existieren zwar in der Realität nicht, zur Anwendung des im folgenden Kapitel behandelten Oberflächenäquivalenzprinzips werden diese jedoch als fiktive Ersatzgrößen eingeführt, um Sprünge der Tangentialkomponenten der elektrischen Feldstärke und, damit verbunden, der Normalkomponente der magnetischen Flussdichte zu realisieren. Von Bedeutung sind die Gleichungen (2.1.7) insbesondere bei der indirekten Vorgehensweise zur Ableitung von Randintegralgleichungen, bei der magnetische und elektrische Quellverteilungen auf der Oberfläche von vornherein als unbekannte Randbedingungen angesetzt werden.

### 2.1.3 Formulierung im Frequenzbereich

Die Anregung eines linearen, zeitinvarianten Systems mit einer zeitharmonischen Funktion ruft eine Antwort mit gleicher Zeitabhängigkeit, aber unterschiedlicher Amplitude und Phase hervor. Diese Eigenschaft begründet sich darauf, dass die komplexe Exponentialfunktion und daraus abgeleitet die trigonometrischen Funktionen Eigenfunktionen

<sup>3</sup>Die verwendeten Oberflächenoperatoren sind im Anhang C.1 definiert.

<sup>4</sup>Die Definition des Spuoperators  $\tau^\pm$  findet sich im Anhang C.1.



des zeitlichen Differentialoperators sind. Sie wird zum Beispiel in der Theorie der Wechselstromrechnung ausgenutzt, um ein gewöhnliches Differentialgleichungssystem in ein einfacher handhabbares algebraisches Gleichungssystem zu überführen. Unter den gleichen Voraussetzungen lässt sich diese Idee auch in einfacher Weise auf feldtheoretische Problemstellungen übertragen, wenn eine Anregung mit einem zeitharmonischen Strom oder einer monochromatischen Welle der Kreisfrequenz  $\omega$  vorliegt und Ausgleichsvorgänge nicht von Interesse sind. Zusätzlich können durch einen Dämpfungsfaktor  $\sigma$  auch auf- oder abklingende zeitharmonische Vorgänge berücksichtigt werden. Unter der Annahme linearer, zeitinvarianter Materialeigenschaften ist bei einer derartigen Anregung ein Ansatz der Form

$$\vec{F}(\vec{r}, t) = \hat{\vec{F}}(\vec{r}) \exp(-\sigma t) \cos[\omega t + \varphi(\vec{r})] \quad (2.1.8)$$

mit einer vom Ort abhängigen Feldamplitude und Phasenverschiebung gerechtfertigt, wobei die Funktion  $\vec{F}$  durch eine beliebige Feldgröße zu ersetzen ist. Als vorteilhafter erweist sich jedoch der um den Imaginärteil erweiterte komplexe Lösungsansatz

$$\underline{\vec{F}}(\vec{r}, t) = \hat{\vec{F}}(\vec{r}) \exp[j\varphi(\vec{r})] \exp[j(\omega + j\sigma)t] = \underline{\vec{F}}(\vec{r}) \exp[j(\omega + j\sigma)t], \quad (2.1.9)$$

der gleichermaßen die Differentialgleichungen erfüllt. Aufgrund der vorausgesetzten Linearität folgt dies sowohl für den Realteil, der den ursprünglichen Ansatz darstellt, als auch für den Imaginärteil. Damit lassen sich die MAXWELLSchen Gleichungen (2.1.2) mit Hilfe komplexer Amplituden  $\underline{\vec{F}}(\vec{r})$ , die auch als Phasoren bezeichnet werden, sowie der komplexen Kreisfrequenz  $\underline{\omega} = \omega + j\sigma$  wie folgt ausdrücken:

$$\text{rot } \underline{\vec{E}} = -j\underline{\omega} \underline{\vec{B}}, \quad (2.1.10a)$$

$$\text{rot } \underline{\vec{H}} = j\underline{\omega} \underline{\vec{D}} + \underline{\vec{J}}, \quad (2.1.10b)$$

$$\text{div } \underline{\vec{D}} = \underline{\rho}, \quad (2.1.10c)$$

$$\text{div } \underline{\vec{B}} = 0. \quad (2.1.10d)$$

Die Bildung des Realteils aus dem mit dem Zeitfaktor  $\exp(j\underline{\omega}t)$  erweiterten Phasor

$$\vec{F}(\vec{r}, t) = \text{Re} \left\{ \underline{\vec{F}}(\vec{r}) \exp(j\underline{\omega}t) \right\} \quad (2.1.11)$$

gestattet die Rückführung dieser mathematischen Hilfsgrößen auf reale physikalische Felder. Anzumerken ist, dass es für die später durchzuführende Eigenwertberechnung unentbehrlich ist, auch gedämpfte Wellen mit einzubeziehen, um das gesamte Spektrum von Eigenlösungen erfassen zu können.

## 2.2 Randintegralgleichungsmethode

### 2.2.1 Darstellungsformeln für elektromagnetische Felder

Ausgangspunkt für die Ableitung einer Integraldarstellung elektromagnetischer Felder soll das in Abbildung 2.1a) gezeigte Modellproblem sein. Eine aus zwei Anteilen  $\underline{\vec{J}}_1$  und  $\underline{\vec{J}}_2$  bestehende ungedämpfte, zeitharmonische Stromverteilung, die sowohl örtlich als auch in

der Amplitude beschränkt ist und als eingepägt angesehen werden kann, befindet sich im freien Raum mit linearer, isotroper und homogener Permittivität  $\varepsilon$  und Permeabilität  $\mu$  sowie verschwindender Leitfähigkeit  $\kappa = 0$ . Zusätzlich breitet sich eine ebenfalls zeitharmonische, ungedämpfte Welle, die durch die elektrische Feldstärke  $\vec{E}_0$  beschrieben wird und beispielsweise durch eine weit entfernt liegende Quelle angeregt wird, im betrachteten Rechengebiet aus. Sie ist Lösung der homogenen MAXWELLSchen Gleichungen im ungestörten Freiraum, muss aber nicht notwendigerweise der Abstrahlungsbedingung genügen. Die Linearität des vorliegenden Modellproblems gestattet die Anwendung des Superpositionsprinzips, wonach sich das elektrische Gesamtfeld aus dem Feld der einfallenden Welle  $\vec{E}_0$  und den durch die beiden Quellen  $\vec{J}_{1/2}$  hervorgerufenen Feldern  $\vec{E}_{1/2}$  zusammensetzt

$$\vec{E} = \vec{E}_0 + \vec{E}_1 + \vec{E}_2, \quad (2.2.1)$$

so dass zwei voneinander unabhängige Probleme vorliegen. Zur Bestimmung der durch die beiden Volumenstromdichten erregten elektromagnetischen Felder ist eine der beiden partiellen Differentialgleichungen

$$\text{rot rot } \vec{E}_{1/2} - k^2 \vec{E}_{1/2} = -jkZ \vec{J}_{1/2}, \quad (2.2.2a)$$

$$\text{rot rot } \vec{H}_{1/2} - k^2 \vec{H}_{1/2} = \text{rot } \vec{J}_{1/2}, \quad (2.2.2b)$$

die aus den MAXWELLSchen Gleichungen (2.1.10) ableitbar sind, in Verbindung mit der SILVER-MÜLLER-Abstrahlungsbedingung

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \left( \vec{r} \times \text{rot } \vec{E}_{1/2} - jkr \vec{E}_{1/2} \right) = 0, \quad (2.2.3a)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \left( \vec{r} \times \text{rot } \vec{H}_{1/2} - jkr \vec{H}_{1/2} \right) = 0 \quad (2.2.3b)$$

und unter der physikalisch motivierten Annahme stetiger Feldgrößen zu lösen. Hierin bezeichnet  $k = \omega\sqrt{\mu\varepsilon}$  die Wellenzahl und  $Z = \sqrt{\mu\varepsilon}^{-1}$  den Wellenwiderstand des Mediums.

Aus der Signal- und Systemtheorie ist bekannt, dass ein lineares und zeitinvariantes System durch dessen Impulsantwort, die als Reaktion auf eine Stoßanregung interpretiert werden kann, vollständig charakterisiert ist. Zu jeder beliebigen Anregung lässt sich durch Faltung mit der Impulsantwort formal die zugehörige Systemantwort bestimmen. Dieses Konzept lässt sich unter den gleichen Voraussetzungen, die in dem hier betrachteten Modellproblem aufgrund der Annahme räumlich konstanter Materialverteilungen erfüllt sind, auch auf Systeme mit ortsabhängigen Größen übertragen. Als Eingangsgrößen lassen sich die eingepägten Volumenstromdichten, als Ausgangsgrößen die elektrische und magnetische Feldstärke identifizieren. Da alle Systemgrößen vektoriellen Charakter besitzen, bietet sich als Anregung für die Ermittlung der Impulsantwort eine Konstellation aus drei Elementardipolen für die drei Koordinatenrichtungen mit auf Eins normierten Dipolmomenten an, die sich mathematisch aus der Einheitsdyade  $\vec{I}$  und der DIRACschen<sup>5</sup> Deltadistribution  $\delta$  zusammensetzt. Die Lösungen der beiden Gleichungen

$$\text{rot rot } \vec{g}_e - k^2 \vec{g}_e = -jkZ \vec{I} \delta, \quad (2.2.4a)$$

$$\text{rot rot } \vec{g}_m - k^2 \vec{g}_m = \text{rot } (\vec{I} \delta) \quad (2.2.4b)$$

---

<sup>5</sup>Paul Adrien Maurice Dirac, 1902–1984, britischer Physiker

a) Originalanordnung

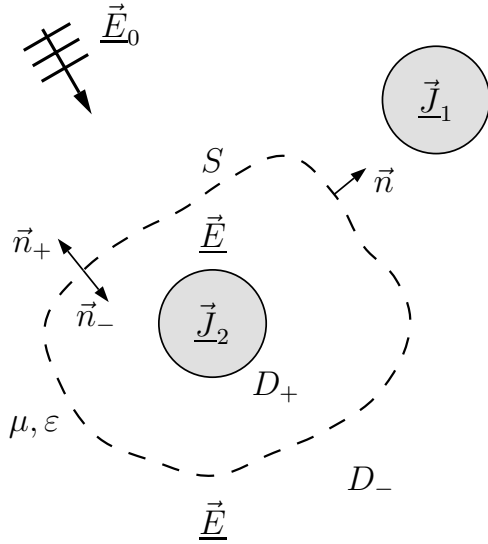
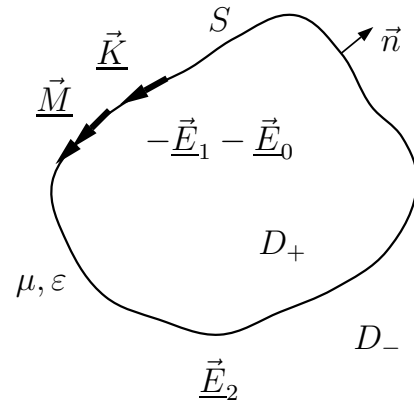
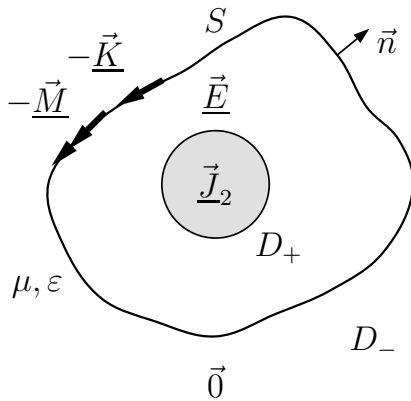
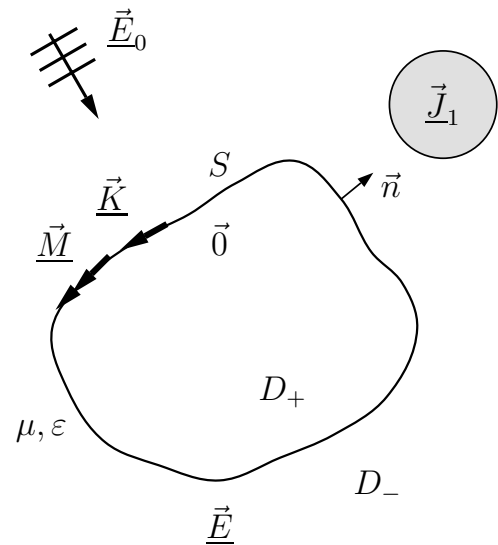
b) äquivalente  
Flächenstromdichtenc) Ersatzanordnung  
für den Innenraumd) Ersatzanordnung  
für den Außenraum

Abbildung 2.1: Veranschaulichung des Äquivalenzprinzips. Das Gesamtfeld der Originalanordnung a) setzt sich aus der Überlagerung der durch die beiden Stromdichten  $\vec{J}_1$  und  $\vec{J}_2$  erregten Anteile sowie des Feldes der einfallenden Welle zusammen. Mit Hilfe äquivalenter magnetischer und elektrischer Flächenstromdichten b), die zugleich den Tangentialkomponenten der elektrischen und magnetischen Feldstärke auf der mathematischen Hüllfläche  $S$  entsprechen, kann eine Ersatzanordnung sowohl für das von der Hüllfläche umschlossene Gebiet c) als auch für den Außenraum d) konstruiert werden. Die Feldstärkeverteilung der Ersatzanordnung entspricht im betrachteten Gebiet exakt derjenigen der Originalanordnung. Das dazu komplementäre Gebiet enthält keine Quellen und ist zudem feldfrei.

mit den Abstrahlungsbedingungen (2.2.3) werden als elektrische GREENSche Dyade

$$\bar{\underline{g}}_e(\vec{r}) = -jkZ \left( \bar{\underline{I}} + \frac{1}{k^2} \text{grad grad} \right) \underline{g}(\vec{r}), \quad (2.2.5)$$

die einem symmetrischen Tensor 2. Stufe entspricht, und magnetische GREENSche Dyade

$$\bar{\underline{g}}_m(\vec{r}) = \text{rot}(\bar{\underline{I}} \underline{g})(\vec{r}), \quad (2.2.6)$$

die einem antisymmetrischen Tensor 2. Stufe entspricht, bezeichnet. Hierin steht

$$\underline{g}(\vec{r}) = \frac{\exp(-jk \|\vec{r}\|)}{4\pi \|\vec{r}\|} \quad (2.2.7)$$

abkürzend für die Fundamentallösung des skalaren HELMHOLTZ<sup>6</sup>-Operators, die über

$$\Delta \underline{g} + k^2 \underline{g} = -\delta \quad (2.2.8)$$

definiert ist. Sowohl die elektrische als auch die magnetische Feldstärke kann schließlich als Faltungsprodukt<sup>7</sup> aus der ermittelten Impulsantwort mit den anregenden Stromdichten dargestellt werden:

$$\vec{\underline{E}}_{1/2}(\vec{r}) = (\bar{\underline{g}}_e \star \vec{\underline{J}}_{1/2})(\vec{r}), \quad \vec{r} \in D_0, \quad (2.2.9a)$$

$$\vec{\underline{H}}_{1/2}(\vec{r}) = (\bar{\underline{g}}_m \star \vec{\underline{J}}_{1/2})(\vec{r}), \quad \vec{r} \in D_0. \quad (2.2.9b)$$

Anzumerken ist, dass die Impulsantwortfunktionen außer im Ursprung, wo sie eine Singularität aufweisen, überall beliebig oft stetig differenzierbar sind. Bei der Auswertung des Faltungsintegrals sind deshalb für Beobachtungspunkte innerhalb der Quellverteilung gesonderte Grenzwertbetrachtungen vorzunehmen.

Der über die MAXWELLSchen Gleichungen gegebene Zusammenhang zwischen der elektrischen und magnetischen Feldstärke überträgt sich erwartungsgemäß auf die GREENSchen Dyaden. Mit  $Y = Z^{-1}$  folgt:

$$-jkZ \bar{\underline{g}}_m = \text{rot} \bar{\underline{g}}_e, \quad (2.2.10a)$$

$$jkY \bar{\underline{g}}_e = \text{rot} \bar{\underline{g}}_m - \bar{\underline{I}} \delta. \quad (2.2.10b)$$

Zur Vereinfachung und übersichtlichen Gestaltung der Rechnung soll im weiteren Verlauf die unter dem Faltungsintegral auftretende Verkettung der Impulsantwort mit dem Differenzvektor von Beobachtungs- und Integrationspunkt als Funktion von zwei Ortsvektoren eingeführt werden:

$$\underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') := \underline{g}(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2.2.11)$$

Sämtliche Operationen, die auf diese Funktion ausgeführt werden, wirken partiell auf eines der beiden Argumente und werden dementsprechend durch einen Index gekennzeichnet.

<sup>6</sup>Hermann Ludwig Ferdinand von Helmholtz, 1821–1894, deutscher Physiologe und Physiker

<sup>7</sup>Die Faltung einer Dyade mit einem Vektorfeld ist durch  $(\bar{\underline{G}} \star \vec{F})(\vec{r}) := \int_{D_0} \bar{\underline{G}}(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \vec{F}(\vec{r}') dV(\vec{r}')$  definiert. Zu beachten ist, dass die unter dem Integral auftretende Verknüpfung von Dyade mit einem Vektor im Allgemeinen nicht vertauschbar ist, womit dieses Faltungsprodukt nichtkommutativ ist.

Wie in Abbildung 2.1a) angedeutet ist, wird der betrachtete Freiraum  $D_0$  in zwei Gebiete aufgeteilt, indem um die Stromverteilung  $\vec{J}_2$  eine hinreichend glatte mathematische Hüllfläche  $S$  gelegt wird, die das einfach zusammenhängende Gebiet  $D_+$  einschließt. Das Gebiet außerhalb dieser Hüllfläche wird mit  $D_-$  bezeichnet und enthält die Stromverteilung  $\vec{J}_1$ . Es soll vereinbart werden, dass der Normaleneinheitsvektor  $\vec{n} = \pm \vec{n}_\pm$  der Hüllfläche in den Außenraum zeigt.

Kernstück der direkten Herleitung integraler Darstellungsformeln für die elektromagnetischen Feldgrößen bildet das dyadische GREENSche Theorem 2. Art [83]

$$\int_D \left[ \vec{F} \cdot (\text{rot rot } \vec{G}) - (\text{rot rot } \vec{F}) \cdot \vec{G} \right] dV = - \int_{\partial D} \left[ (\vec{n} \times \vec{F}) \cdot \text{rot } \vec{G} + (\vec{n} \times \text{rot } \vec{F}) \cdot \vec{G} \right] dA \quad (2.2.12)$$

als Verallgemeinerung der partiellen Integration. Die Gültigkeit und damit die Anwendbarkeit dieses Theorems ist an bestimmte Voraussetzungen bezüglich der Regularität der Dyade  $\vec{G}$  und des Vektorfelds  $\vec{F}$  gebunden, die in dem hier betrachteten Fall erfüllt sind, solange der Beobachtungspunkt nicht auf der Hüllfläche liegt. Im weiteren Verlauf wird nur die Lösung für das elektrische Feld betrachtet, die Ableitung der Integraldarstellung für das magnetische Feld erfolgt in gleicher Weise. Für das erste Teilproblem mit  $\vec{J}_1$  als Quelle kann das Faltungsintegral auf das Gebiet  $D_-$ , für das zweite Teilproblem mit  $\vec{J}_2$  als Quelle entsprechend auf  $D_+$  beschränkt werden, da nach Voraussetzung beide Funktionen einen kompakten Träger besitzen. Mit Hilfe des GREENSchen Theorems kann das Faltungsintegral in Gleichung (2.2.9a) unter Einbeziehung der Bestimmungsgleichungen für die elektrische GREENSche Dyade (2.2.4a) und der elektrischen Feldstärke (2.2.2a) sowie des Induktionsgesetzes (2.1.10a) wie folgt umgeformt werden:

$$\begin{aligned} (\vec{g}_e \star \vec{J}_{1/2})(\vec{r}) &= \int_{D_\mp} \vec{E}_{1/2}(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') dV(\vec{r}') + \int_S \left[ (\vec{n}_\mp \times \vec{H}_{1/2})(\vec{r}') \cdot \vec{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') \dots \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{jkZ} (\vec{n}_\mp \times \vec{E}_{1/2})(\vec{r}') \cdot (\text{rot}_{\vec{r}'} \vec{G}_e)(\vec{r}, \vec{r}') \right] dA(\vec{r}'), \quad \vec{r} \notin S. \end{aligned} \quad (2.2.13)$$

Bei der Betrachtung des Außengebietes  $D_-$  tritt ein zusätzliches Oberflächenintegral über die Fernkugeloberfläche auf, welches aber wegen der Erfüllung der Abstrahlungsbedingung identisch verschwindet. Ausnutzung der Siebeigenschaft der Deltadistribution und Einarbeitung der Relation in Gleichung (2.2.10a) liefert mit dem ortsabhängigen Vorfaktor

$$c(\vec{r}) := \begin{cases} 1, & \vec{r} \in D_- \\ 0, & \vec{r} \in D_+ \end{cases} \quad (2.2.14)$$

den für das Oberflächenäquivalenzprinzip entscheidenden Zusammenhang

$$\int_S \left[ \vec{G}_e(\vec{r}, \vec{r}') \cdot (\vec{n}_- \times \vec{H}_1)(\vec{r}') + \vec{G}_m(\vec{r}, \vec{r}') \cdot (\vec{n}_- \times \vec{E}_1)(\vec{r}') \right] dA(\vec{r}') = [1 - c(\vec{r})] \vec{E}_1(\vec{r}). \quad (2.2.15)$$

Daraus geht hervor, dass der Wert des Hüllflächenintegrals für Beobachtungspunkte innerhalb des Teilgebiets, in dem die Quelle platziert ist, identisch verschwindet und außerhalb

exakt dem durch diese Quelle hervorgerufenen Feld entspricht. Fasst man die Randbedingungen als flächenhafte Quellverteilungen auf, folgt daraus, dass die im Außengebiet befindlichen Volumenstromdichten durch äquivalente Oberflächenströme ersetzt werden können, ohne das Feld im betrachteten Teilgebiet zu verändern. Analog erhält man eine ähnliche Gleichung für das zweite Teilproblem:

$$\int_S \left[ \bar{\underline{G}}_e(\vec{r}, \vec{r}') \cdot (\vec{n}_+ \times \vec{H}_2)(\vec{r}') + \bar{\underline{G}}_m(\vec{r}, \vec{r}') \cdot (\vec{n}_+ \times \vec{E}_2)(\vec{r}') \right] dA(\vec{r}') = c(\vec{r}) \vec{E}_2(\vec{r}). \quad (2.2.16)$$

Um schließlich zu der gewünschten Form zu gelangen, wird zusätzlich eine integrale Darstellung der einfallenden Welle benötigt

$$- \int_S \left[ \bar{\underline{G}}_e(\vec{r}, \vec{r}') \cdot (\vec{n} \times \vec{H}_0)(\vec{r}') + \bar{\underline{G}}_m(\vec{r}, \vec{r}') \cdot (\vec{n} \times \vec{E}_0)(\vec{r}') \right] dA(\vec{r}') = [1 - c(\vec{r})] \vec{E}_0(\vec{r}), \quad (2.2.17)$$

welche ebenfalls ein Ergebnis der Anwendung des GREENSchen Theorems ist. Kombination der bisher gewonnenen Ergebnisse liefert unter Berücksichtigung von Gleichung (2.2.1) und  $\vec{n}_\pm = \pm \vec{n}$  schließlich eine räumlich stückweise definierte Integraldarstellung für die elektrische Feldstärke

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}) = & \int_{D_\mp} \bar{\underline{G}}_e(\vec{r}, \vec{r}') \cdot \vec{J}(\vec{r}') dV(\vec{r}') \pm \int_S \left[ \bar{\underline{G}}_e(\vec{r}, \vec{r}') \cdot (\vec{n} \times \vec{H})(\vec{r}') \dots \right. \\ & \left. + \bar{\underline{G}}_m(\vec{r}, \vec{r}') \cdot (\vec{n} \times \vec{E})(\vec{r}') \right] dA(\vec{r}') + c(\vec{r}) \vec{E}_0(\vec{r}), \quad \vec{r} \in D_\mp. \end{aligned} \quad (2.2.18)$$

Ausgehend von Gleichung (2.2.9b) erhält man bei gleicher Vorgehensweise die entsprechende Darstellungsformel für die magnetische Feldstärke:

$$\begin{aligned} \vec{H}(\vec{r}) = & \int_{D_\mp} \bar{\underline{G}}_m(\vec{r}, \vec{r}') \cdot \vec{J}(\vec{r}') dV(\vec{r}') \pm \int_S \left[ \bar{\underline{G}}_m(\vec{r}, \vec{r}') \cdot (\vec{n} \times \vec{H})(\vec{r}') \dots \right. \\ & \left. - Y^2 \bar{\underline{G}}_e(\vec{r}, \vec{r}') \cdot (\vec{n} \times \vec{E})(\vec{r}') \right] dA(\vec{r}') + c(\vec{r}) \vec{H}_0(\vec{r}), \quad \vec{r} \in D_\mp. \end{aligned} \quad (2.2.19)$$

Abhängig von dem gewählten Vorzeichen repräsentiert dieses Ergebnis, wie in Abbildung 2.1 verdeutlicht, äquivalente Ersatzanordnungen für die beiden, aus der Aufteilung des freien Raumes durch die mathematische Hüllfläche hervorgegangenen Teilgebiete. Die Feldverteilung innerhalb des für die Ersatzanordnung gültigen Teilgebiets entspricht weiterhin derjenigen der Originalanordnung, wohingegen der dazu komplementäre Teilraum keine Quellen aufweist und zudem feldfrei ist. Damit kann dieser Teilraum mit einem beliebigen Material gefüllt werden, ohne die in den Ersatzanordnungen vorliegenden Verhältnisse zu beeinflussen. Beim Durchgang durch die Hüllfläche ändern sich die Tangentialkomponenten der elektrischen und magnetischen Feldstärke sprunghaft auf den Wert Null, weshalb in Übereinstimmung mit Gleichung (2.1.6) die in den Oberflächenintegralen auftretenden tangentialen Dichtefunktionen als elektrische und magnetische Flächenstromdichte

$$\vec{K} := \vec{n} \times \vec{H}, \quad (2.2.20a)$$

$$\vec{M} := -\vec{n} \times \vec{E} \quad (2.2.20b)$$

interpretiert werden können. An Stelle des ursprünglichen Problems treten zwei separate Ersatzprobleme, die über die fiktiven elektrischen und magnetischen Oberflächenströme auf der Grenzschicht, welche gerade den Randwerten entsprechen, miteinander gekoppelt sind.

Gleichungen (2.2.18) und (2.2.19) bilden den zentralen Ausgangspunkt unterschiedlicher integraler Darstellungsformeln für elektromagnetische Felder. Nach einigen vektoranalytischen Umformungen und unter Verwendung klassischer Integralsätze lassen sich daraus unter Berücksichtigung der Kontinuitätsgleichung die STRATTON-CHU-Darstellungsformeln ableiten, welche sich mit Hilfe des aus der Potentialtheorie bekannten elektrischen und magnetischen Vektorpotentials

$$\vec{A}_e^\pm(\vec{r}) := \int_{D_\pm} \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') \underline{\vec{J}}(\vec{r}') dV(\vec{r}') \mp \int_S \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') \underline{\vec{K}}(\vec{r}') dA(\vec{r}'), \quad (2.2.21a)$$

$$\vec{A}_m^\pm(\vec{r}) := \pm \int_S \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') \underline{\vec{M}}(\vec{r}') dA(\vec{r}') \quad (2.2.21b)$$

sowie des elektrischen und magnetischen Skalarpotentials

$$\Phi_e^\pm(\vec{r}) := \frac{1}{\varepsilon} \int_{D_\pm} \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') \underline{\varrho}(\vec{r}') dV(\vec{r}') \mp \frac{1}{\varepsilon} \int_S \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') \underline{\sigma}(\vec{r}') dA(\vec{r}'), \quad (2.2.22a)$$

$$\Phi_m^\pm(\vec{r}) := \mp \frac{1}{\mu} \int_S \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') \underline{\eta}(\vec{r}') dA(\vec{r}') \quad (2.2.22b)$$

nach Vertauschen von Differentiation und Integration in der kompakten Schreibweise

$$\vec{E}(\vec{r}) = -jkZ \vec{A}_e^\pm(\vec{r}) - (\text{grad } \Phi_e^\pm)(\vec{r}) + (\text{rot } \vec{A}_m^\pm)(\vec{r}) + c(\vec{r}) \vec{E}_0(\vec{r}), \quad \vec{r} \in D_\pm, \quad (2.2.23a)$$

$$\vec{H}(\vec{r}) = jkY \vec{A}_m^\pm(\vec{r}) - (\text{grad } \Phi_m^\pm)(\vec{r}) + (\text{rot } \vec{A}_e^\pm)(\vec{r}) + c(\vec{r}) \vec{H}_0(\vec{r}), \quad \vec{r} \in D_\pm \quad (2.2.23b)$$

ausdrücken lassen. In der gezeigten Form ist deren Gültigkeit auf stetige Oberflächenstromdichten beschränkt. Eine Erweiterung auf unstetige Funktionen ist möglich und führt auf zusätzliche Korrekturterme in Form von Linienintegralen entlang der Sprungstelle auf der Oberfläche. Der durch die MAXWELLSchen Gleichungen gegebene Zusammenhang zwischen den Tangentialkomponenten und den Normalkomponenten der Feldstärken, die als elektrische und magnetische Flächenladungsdichten

$$\underline{\sigma} := \varepsilon(\vec{n} \cdot \vec{E}), \quad (2.2.24a)$$

$$\underline{\eta} := \mu(\vec{n} \cdot \vec{H}) \quad (2.2.24b)$$

angesehen werden können, impliziert eine Abhängigkeit der Skalarpotentiale von den Vektorpotentialen, die in der Potentialtheorie auch als LORENZ<sup>8</sup>-Eichung

$$\text{div } \vec{A}_m^\pm = jkZ \Phi_m^\pm, \quad (2.2.25a)$$

$$\text{div } \vec{A}_e^\pm = -jkY \Phi_e^\pm \quad (2.2.25b)$$

---

<sup>8</sup>Ludvig Lorenz, 1829–1891, dänischer Physiker

bekannt ist.

Als weitere bedeutsame Darstellungsformeln sind die FRANZschen Beugungsintegrale zu nennen

$$\vec{E}(\vec{r}) = (\text{rot } \vec{A}_m^\pm)(\vec{r}) + \frac{1}{jkY}(\text{rot rot } \vec{A}_e^\pm)(\vec{r}) - \frac{1}{jkY}\vec{J}(\vec{r}) + c(\vec{r})\vec{E}_0(\vec{r}), \quad \vec{r} \in D_\pm, \quad (2.2.26a)$$

$$\vec{H}(\vec{r}) = (\text{rot } \vec{A}_e^\pm)(\vec{r}) - \frac{1}{jkZ}(\text{rot rot } \vec{A}_m^\pm)(\vec{r}) + c(\vec{r})\vec{H}_0(\vec{r}), \quad \vec{r} \in D_\pm, \quad (2.2.26b)$$

die sich leicht aus den STRATTON-CHU-Formeln gewinnen lassen und deren besonderer Vorzug im Wegfall der Einschränkung auf stetige Randbelegungen liegt.

Die bisherigen Überlegungen führten zu dem Ergebnis, dass für einfach zusammenhängende Teilgebiete des homogenen Freiraumes Ersatzanordnungen konstruiert werden können, indem die Wirkung des restlichen Raumes durch äquivalente Ströme auf der Grenzfläche berücksichtigt werden, so dass dieser Teil quellen- und feldfrei ist. Eine Verallgemeinerung des vorgestellten Äquivalenzprinzips nach Abbildung 2.2 schafft die Basis zur Gewinnung einer Vielzahl von Integralgleichungsformulierungen für unterschiedliche Problemtypen.

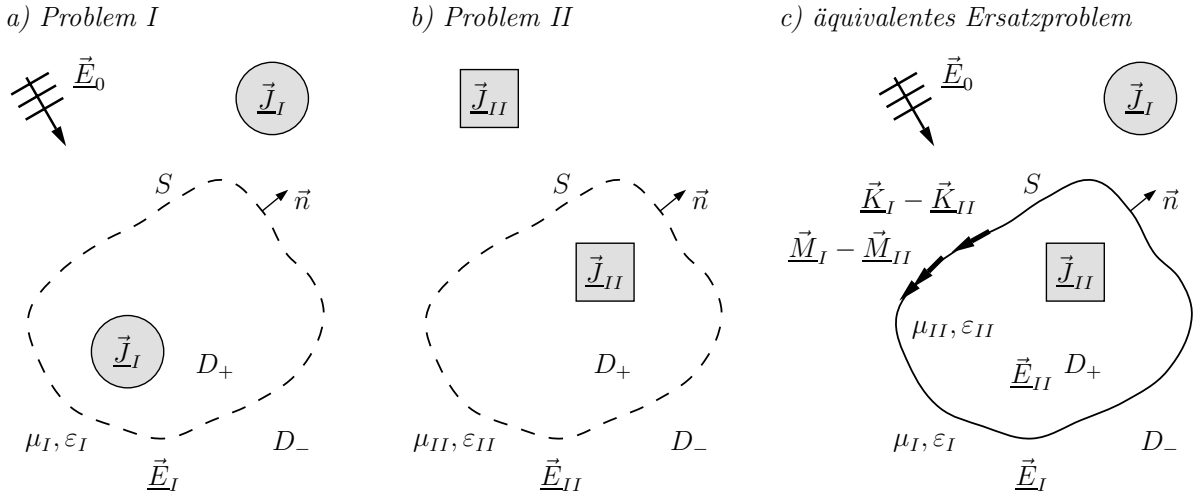


Abbildung 2.2: Verallgemeinerung des Oberflächenäquivalenzprinzips. Durch Superposition der Ersatzanordnung für den Außenraum des homogenen Freiraumproblems a), das die Quellverteilung  $\vec{J}_I$  und die Materialgrößen  $\epsilon_I, \mu_I$  besitzt, mit der Ersatzanordnung für den Innenraum eines weiteren homogenen Freiraumproblems b), das die Quellverteilung  $\vec{J}_{II}$  und die Materialgrößen  $\epsilon_{II}, \mu_{II}$  besitzt, lässt sich eine äquivalente Anordnung für ein inhomogenes Problem c) erzeugen [50].

Betrachtet werden zwei homogene Freiraumprobleme mit den in Abbildung 2.2 angegebenen Material- und Quellverteilungen, die durch dieselbe geschlossene Fläche in zwei Teile zerlegt werden. Mit Hilfe äquivalenter Oberflächenströme lässt sich für den Außenraum des Problems I eine Ersatzanordnung finden, wobei das innere Gebiet wegen der Feldfreiheit mit dem Material des Problems II gefüllt werden kann. Analog dazu wird für das Innengebiet des zweiten Problems eine Ersatzanordnung aufgestellt und das feldfreie Außengebiet mit dem Material des ersten Problems gefüllt. Beide Ersatzanordnungen weisen



eine identische inhomogene Materialverteilung auf, besitzen aber unterschiedliche Quellen. Die Überlagerung sämtlicher Quellen beider Ersatzanordnungen führt demzufolge zur Addition der beiden Feldlösungen. Da der jeweils komplementäre Teilraum feldfrei ist, wird die Feldverteilung im Außenraum des so erzeugten Problems dem Feld des Problems I und im Innenraum dem Feld des Problems II entsprechen [50]. Damit ist es nun umgekehrt möglich, eine bestimmte Klasse von inhomogenen Problemstellungen in mehrere gleichwertige homogene Probleme zu überführen, wofür leicht Darstellungsformeln angegeben werden können. Stellt beispielsweise der von der Hüllfläche eingeschlossene Teilraum einen dielektrischen Streukörper dar, können mit Hilfe des Äquivalenzprinzips getrennt für das Innen- und Außengebiet Randintegralgleichungen aufgestellt werden, welche über die aus den Stetigkeitsbedingungen an Grenzflächen folgenden Forderung, dass die zugehörigen äquivalenten Flächenströme übereinstimmen müssen, miteinander gekoppelt sind. Neben den genannten Transmissionsproblemen sind mit diesem Modell ebenfalls die üblichen inneren und äußeren Randwertprobleme, die abhängig von der Vorgabe auf der Oberfläche als DIRICHLETSche<sup>9</sup>, NEUMANNsche<sup>10</sup> oder gemischte Randwertaufgabe bezeichnet werden, erfassbar [77].

### 2.2.2 Oberflächenintegralgleichungsformulierungen

Mit Hilfe der Darstellungsformeln können bei Kenntnis der äquivalenten Flächenstromdichten die elektromagnetischen Felder im betrachteten Rechengebiet direkt bestimmt werden. Die Randwerte sind jedoch im Allgemeinen unbekannt, weshalb aus den Darstellungsformeln Bestimmungsgleichungen für dieselben abgeleitet werden müssen. Da die Darstellungsformeln ihre Gültigkeit für Beobachtungspunkte auf der Hüllfläche verlieren, muss dies in geeigneter Weise durch einen Grenzwertprozess erfolgen. Die äquivalenten magnetischen und elektrischen Flächenströme entsprechen nach den Gleichungen (2.2.20) den Tangentialkomponenten der elektrischen und magnetischen Feldstärke auf der Hüllfläche, so dass wegen der Annahme stetiger Feldgrößen in dem hier zugrunde liegenden Modellproblem die Grenzwerte bei Annäherung an die Hüllfläche mit den Funktionswerten selbst auf diesem Rand übereinstimmen müssen:

$$(\vec{n} \times \tau_n^\pm \vec{E})(\vec{r}) = (\vec{n} \times \vec{E})(\vec{r}), \quad \vec{r} \in S, \quad (2.2.27a)$$

$$(\vec{n} \times \tau_n^\pm \vec{H})(\vec{r}) = (\vec{n} \times \vec{H})(\vec{r}), \quad \vec{r} \in S. \quad (2.2.27b)$$

Selbst bei der mathematischen Modellierung eines örtlich beschränkten physikalischen Problems als formale Randwertaufgabe stellt die Annahme einer stetigen Fortsetzung der Feldgrößen in die vorgegebenen Randwerte eine sinnvolle Forderung dar, weil andernfalls die eindeutige Lösbarkeit nicht mehr sichergestellt wäre.

Die Durchführung dieses Grenzübergangs auf die Darstellungsformeln liefert die gewünschten Randintegralgleichungen, die einen Zusammenhang zwischen den magnetischen und elektrischen Flächenstromdichten sowie zwischen den magnetischen und elektrischen Flächenladungsdichten herstellen. Sowohl für die spätere numerische Auswertung als auch

<sup>9</sup>Peter Gustav Lejeune Dirichlet, 1805–1859, deutscher Mathematiker

<sup>10</sup>Carl Gottfried Neumann, 1832–1925, deutscher Mathematiker

für die Ableitung der Modellgleichung unendlich dünner Streuobjekte sind die resultierenden Ausdrücke wegen der enthaltenen Grenzwertbildung wenig praktikabel. Wünschenswert ist eine Formulierung, bei der sich die Beobachtungspunkte auf der Hüllfläche befinden, was jedoch wegen des singulären Verhaltens der GREENSchen Funktion auf uneigentliche Integrale führt, die unter Umständen im klassischen Sinn divergieren können. Ziel ist somit zum einen die Definition sinnvoller Grenzwerte für die uneigentlichen Integrale und zum anderen die Herstellung eines Zusammenhangs mit den interessierenden Grenzfunktionen bei Annäherung des Beobachtungspunktes an die Hüllfläche.

Unter der Annahme einer glatten Fläche sowie HÖLDER<sup>11</sup>-stetiger Flächenladungsdichten und HÖLDER-stetiger Tangentialableitungen der Flächenstromdichten sind die links- und rechtsseitigen Grenzwerte der Vektor- und Skalarpotentiale bei Annäherung an die Hüllfläche beschränkt, einander gleich und stimmen mit den Werten der uneigentlichen Integrale für Beobachtungspunkte auf der Hüllfläche, die wegen der schwach singulären Kerne im gewöhnlichen Sinn konvergieren, überein. Damit sind die Potentiale auch beim Durchgang durch die Hüllfläche überall stetig und die Grenzwerte können durch die uneigentlichen Integrale ersetzt werden:

$$(\tau_n^\pm \underline{\Phi}_m)(\vec{r}) = \underline{\Phi}_m(\vec{r}) = \frac{1}{\mu} \int_S \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') \underline{\eta}(\vec{r}') dA(\vec{r}'), \quad \vec{r} \in S, \quad (2.2.28a)$$

$$(\tau_n^\pm \underline{\vec{A}}_m)(\vec{r}) = \underline{\vec{A}}_m(\vec{r}) = \int_S \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') \underline{\vec{M}}(\vec{r}') dA(\vec{r}'), \quad \vec{r} \in S. \quad (2.2.28b)$$

Die Skalar- und Vektorpotentiale sind jedoch nicht stetig differenzierbar, denn sowohl die Normalkomponente des Gradienten des Skalarpotentials als auch die Tangentialkomponenten der Wirbel des Vektorpotentials ändern sprunghaft ihren Wert beim Durchgang durch die Hüllfläche. Somit existiert die Ableitung auf der Hüllfläche nicht im klassischen Sinn. Als sehr nützlich erweist sich daher die Einführung des CAUCHYSchen<sup>12</sup> Hauptwertes der in den Gleichungen (2.2.23) auftretenden Ableitungen der Potentiale, welcher mit dem interessierenden rechts- und linksseitigen Grenzwert über die Sprungbeziehung

$$(\tau_n^\pm \text{grad } \underline{\Phi}_m)(\vec{r}) = \frac{1}{\mu} \left[ \oint_S (\text{grad}_{\vec{r}} \underline{G})(\vec{r}, \vec{r}') \underline{\eta}(\vec{r}') dA(\vec{r}') \pm \frac{1}{2} (\vec{n} \underline{\eta})(\vec{r}) \right], \quad (2.2.29a)$$

$$(\tau_n^\pm \text{rot } \underline{\vec{A}}_m)(\vec{r}) = \left[ \oint_S (\text{grad}_{\vec{r}} \underline{G})(\vec{r}, \vec{r}') \times \underline{\vec{M}}(\vec{r}') dA(\vec{r}') \pm \frac{1}{2} (\vec{n} \times \underline{\vec{M}})(\vec{r}) \right] \quad (2.2.29b)$$

verknüpft ist [54]. Für das elektrische Skalar- und Vektorpotential ergeben sich ähnliche Zusammenhänge, aus denen unmittelbar die wohl bekannten Stetigkeitsbedingungen für

<sup>11</sup>Otto Ludwig Hölder, 1859–1937, deutscher Mathematiker

Eine Funktion  $f$  wird als HÖLDER-stetig zum Exponenten  $\alpha$  bezeichnet, wenn eine positive reelle Zahl  $c$  existiert, so dass  $|f(x) - f(y)| \leq c|x - y|^\alpha$  gilt.

<sup>12</sup>Augustin Louis Cauchy, 1789–1857, französischer Mathematiker

Als CAUCHYScher Hauptwert an der Stelle  $\vec{r}_0$  wird mit  $S_\varepsilon(\vec{r}_0) = \{\vec{r} : \|\vec{r} - \vec{r}_0\| \leq \varepsilon\}$  der Grenzwert  $\oint_{S \setminus S_\varepsilon(\vec{r}_0)} f(\vec{r}) dA(\vec{r}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \oint_{S \setminus S_\varepsilon(\vec{r}_0)} f(\vec{r}) dA(\vec{r})$  verstanden. Er kann als Distribution aufgefasst werden und stimmt bei integrierbaren Funktionen mit dem Wert des gewöhnlichen Integrals überein.

die elektrische und magnetische Feldstärke an Grenzschichten mit Flächenladungen und Flächenströmen folgen. Wegen der nach Vertauschen von Differentiation und Integration im Kern enthaltenen starken Singularität existieren diese Integrale nur im distributionellen Sinn.

Für die Doppelwirbel des Vektorpotentials in den Gleichungen (2.2.26) ist eine weitere Grenzwertdefinition für divergente Integrale erforderlich, da für sie selbst der CAUCHYSche Hauptwert nicht existiert. Durch Festlegung des Funktionswertes auf der Oberfläche als *part-fini*-Integral im HADAMARDSchen<sup>13</sup> Sinn können die Doppelwirbel stetig auf die Hüllfläche fortgesetzt werden, da dieses Integral mit den rechts- und linksseitigen Grenzwerten übereinstimmt:

$$(\tau_n^\pm \text{rot rot } \vec{A}_m)(\vec{r}) = \oint_S \text{rot}_{\vec{r}} \text{rot}_{\vec{r}'} [\underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') \vec{M}(\vec{r}')] dA(\vec{r}'). \quad (2.2.30)$$

### 2.2.2.1 Streuprobleme mit ideal elektrisch leitfähigen Körpern

Ein Hauptanwendungsgebiet von Randintegralgleichungsverfahren stellen elektromagnetische Streuprobleme dar, die wie folgt formuliert werden können: Eine zeitharmonische, ungedämpfte, ebene Welle mit der Kreisfrequenz  $\omega$  und der Amplitude  $\underline{E}_0$

$$\vec{E}^{\text{inc}}(\vec{r}) = \underline{E}_0 [\vec{p}_i + jv(\vec{p}_i \times \vec{n}_i)] \exp(-jk\vec{n}_i \cdot \vec{r}), \quad (2.2.31)$$

die sich in Richtung des Einheitsvektors  $\vec{n}_i$  ausbreitet und deren Polarisierung durch den Vektor  $\vec{p}_i$  gegeben ist, trifft auf einen aus ideal elektrisch leitfähigem Material bestehenden Körper, der sich im homogenen Freiraum mit der Permittivität  $\varepsilon_0$  und der Permeabilität  $\mu_0$  befindet. Durch den Parameter  $v \in [0, 1]$  wird die Elliptizität der Welle charakterisiert, wobei sich für  $v = 0$  der Spezialfall einer linear polarisierten und für  $v = 1$  der einer zirkular polarisierten Welle ergibt. Die Anregung induziert auf der Oberfläche des Streukörpers elektrische Ströme, die ihrerseits ein elektromagnetisches Streufeld  $\vec{E}^{\text{sc}}$  anregen, welches sich der einfallenden Welle zu dem Gesamtfeld

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}^{\text{inc}}(\vec{r}) + \vec{E}^{\text{sc}}(\vec{r}) \quad (2.2.32)$$

überlagert. Die induzierte Flächenstromdichte stellt sich derart ein, dass sich innerhalb des ideal elektrisch leitfähigen Streukörpers beide Feldanteile in Gleichung (2.2.32) kompensieren. Dies führt aufgrund der Übergangsbedingungen für die Feldstärkekomponenten auf die Forderung, dass die Tangentialkomponenten des elektrischen Gesamtfeldes auf der Oberfläche des Streuobjekts identisch verschwinden:

$$(\vec{n} \times \vec{E})(\vec{r}) = \vec{0}, \quad \vec{r} \in S. \quad (2.2.33)$$

Das hier behandelte und in Abbildung 2.3a) veranschaulichte Streuproblem stellt lediglich einen einfachen Sonderfall des in Abbildung 2.2c) gezeigten allgemeineren Modellproblems dar. Der Zusammenhang lässt sich leicht durch Identifikation des von der Hüll-

<sup>13</sup>Jacques Salomon Hadamard, 1865–1963, französischer Mathematiker

Der endliche Teil eines hypersingulären Integrals nach HADAMARD ist mit  $S_\varepsilon(\vec{r}_0) = \{\vec{r} : \|\vec{r} - \vec{r}_0\| \leq \varepsilon\}$  durch  $\oint_S f(\vec{r}) dA(\vec{r}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{S \setminus S_\varepsilon} f(\vec{r}) dA(\vec{r}) - \frac{f(\vec{r})}{2\varepsilon}$  definiert.

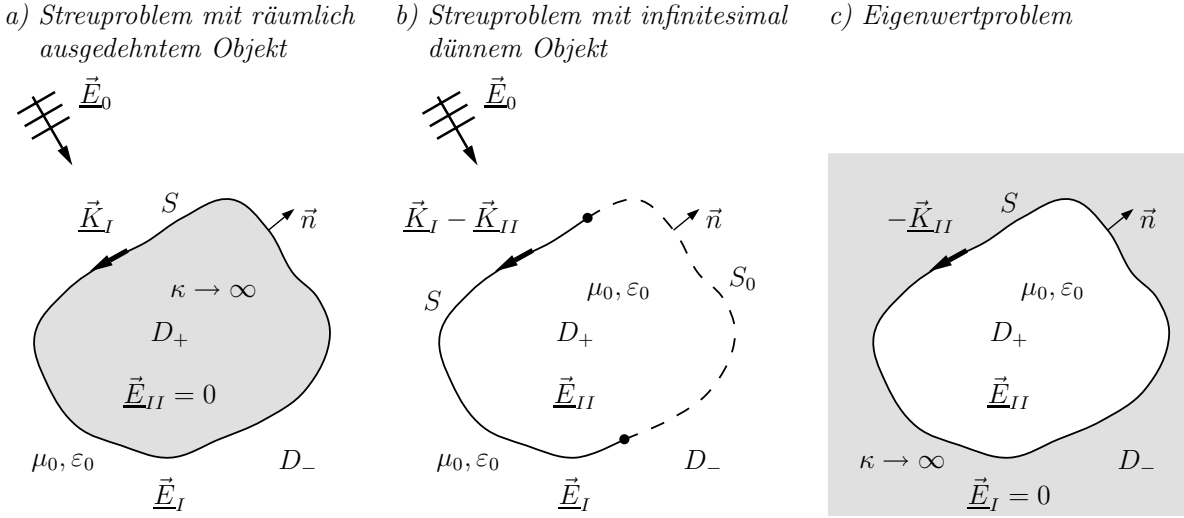


Abbildung 2.3: Modellierung von Streuproblemen mit ideal elektrisch leitenden Objekten und verlustfreien Eigenwertproblemen sowie die Festlegung der zugehörigen äquivalenten Flächenströme. Aufgrund der angenommenen elektrischen Randbedingungen treten keine magnetischen Äquivalenzströme auf.

fläche eingeschlossenen Gebietes  $D_+$  als Streukörper, der Festlegung  $\vec{E}_0 = \vec{E}^{\text{inc}}$ ,  $\varepsilon_I = \varepsilon_0$  und  $\mu_I = \mu_0$  sowie der Vorgabe verschwindender elektrischer Volumenstromdichten im Außenraum des Problems I herstellen. Wegen der geforderten Feldfreiheit innerhalb des Streukörpers braucht Problem II nicht weiter betrachtet zu werden.

Da Problem II nur die triviale Nulllösung besitzt, gilt:

$$\vec{K}_{II}(\vec{r}) = \vec{M}_{II}(\vec{r}) = \vec{0}, \quad \vec{r} \in S. \quad (2.2.34)$$

Die Randbedingung (2.2.33) hat zur Folge, dass die magnetischen Äquivalenzströme auf der Hüllfläche identisch verschwinden

$$\vec{M}_I(\vec{r}) = \vec{0}, \quad \vec{r} \in S, \quad (2.2.35)$$

es verbleibt demnach als unbekannte Größe lediglich die elektrische Äquivalenzstromdichte

$$\vec{K} := \vec{K}_I, \quad (2.2.36)$$

die erwartungsgemäß der induzierten Flächenstromdichte entspricht und der somit eine physikalische Bedeutung beigemessen werden kann.

Aus der Integraldarstellung der elektrischen Feldstärke gemäß Gleichung (2.2.23a) für den Außenraum des Problems I in Abbildung 2.2 folgt nach Einsetzen der Vorgaben und unter Einbeziehung der Grenzwerte gemäß den Gleichungen (2.2.28) eine Integro-Differentialgleichung 1. Art vom FREDHOLMSchen<sup>14</sup> Typ für die auf der Oberfläche des Streukörpers induzierten Flächenströme

$$(\mathcal{T} \vec{K})(\vec{r}) = (\vec{n} \times \vec{E}^{\text{inc}})(\vec{r}), \quad \vec{r} \in S, \quad (2.2.37)$$

<sup>14</sup>Erik Ivar Fredholm, 1866–1927, schwedischer Mathematiker

die auch unter der Bezeichnung *elektrische Feldintegralgleichung* (EFIE) geläufig ist. Eine weitere Randintegralgleichung resultiert aus der Darstellungsformel für die magnetische Feldstärke gemäß Gleichung (2.2.23b) oder Gleichung (2.2.26b)

$$\left[ \left( \frac{1}{2} \mathcal{I} + \mathcal{K} \right) \underline{\vec{K}} \right] (\vec{r}) = (\vec{n} \times \underline{\vec{H}}^{\text{inc}})(\vec{r}), \quad \vec{r} \in S, \quad (2.2.38)$$

die auch als *magnetische Feldintegralgleichung* (MFIE) bezeichnet wird und zur Klasse der FREDHOLMSchen Integralgleichungen 2. Art zählt. Die FRANZsche Darstellungsformel für die elektrische Feldstärke liefert als dritte Möglichkeit eine hypersinguläre Integralgleichung 1. Art

$$(\mathcal{N} \underline{\vec{K}})(\vec{r}) = (\vec{n} \times \underline{\vec{E}}^{\text{inc}})(\vec{r}), \quad \vec{r} \in S. \quad (2.2.39)$$

Die hierin auftretenden Integraloperatoren sind wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} (\mathcal{T} \underline{\vec{K}})(\vec{r}) := & jk_0 Z_0 \vec{n}(\vec{r}) \times \left[ \int_S \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') \underline{\vec{K}}(\vec{r}') dA(\vec{r}') \dots \right. \\ & \left. - \frac{1}{k_0^2} \oint_S (\text{grad}_{\vec{r}'} \underline{G})(\vec{r}, \vec{r}') (\text{Div} \underline{\vec{K}})(\vec{r}') dA(\vec{r}') \right], \end{aligned} \quad (2.2.40a)$$

$$(\mathcal{K} \underline{\vec{K}})(\vec{r}) := \vec{n}(\vec{r}) \times \oint_S (\text{grad}_{\vec{r}'} \underline{G})(\vec{r}, \vec{r}') \times \underline{\vec{K}}(\vec{r}') dA(\vec{r}'), \quad (2.2.40b)$$

$$(\mathcal{N} \underline{\vec{K}})(\vec{r}) := -\frac{1}{jk_0 Y_0} \vec{n}(\vec{r}) \times \oint_S \text{rot}_{\vec{r}} \text{rot}_{\vec{r}'} [\underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') \underline{\vec{K}}(\vec{r}')] dA(\vec{r}'). \quad (2.2.40c)$$

Die eindeutige Lösbarkeit der vorgestellten Integralgleichungen setzt die Festlegung geeigneter Definitions- und Bildbereiche der Operatoren voraus, die abhängig von den Eigenschaften der Anregungsfunktion sowie aus zusätzlichen physikalischen Erwägungen gewählt werden. Große Bedeutung haben in diesem Zusammenhang SOBOLEV<sup>15</sup>-Räume erlangt, denen die Annahme zugrunde liegt, dass die Energie innerhalb beschränkter Gebiete oder Teilgebiete des Freiraums einen endlichen Wert besitzen muss [54]. Auf die exakte Angabe und Erläuterung der zu den einzelnen Integralgleichungen passenden Funktionenräume sowie der Abbildungseigenschaften der Integraloperatoren soll hier nicht näher eingegangen werden. Es sei an dieser Stelle auf die einschlägige Fachliteratur verwiesen [24, 28, 27]. Darin finden sich neben Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen auch Erweiterungen der Theorie für abgeschwächte Anforderungen an die Regularität der Oberflächen [23].

Die Herleitung der bisherigen Randintegralgleichungen wird wegen der formalen Integration der Feldgleichungen unter Verwendung des GREENSchen Theorems auch als direkte oder mathematische Vorgehensweise bezeichnet [84, 24]. Eine weitere Möglichkeit besteht darin, bereits am Anfang von fiktiven Oberflächenströmen auszugehen, für deren elektrodynamische Potentiale die Integraldarstellungen als bekannt vorausgesetzt werden. Die indirekte Vorgehensweise liefert zu den hier gezeigten Formulierungen ähnliche Ergebnisse. Zusätzlich sind weitere Varianten, wie beispielsweise die aus der gewichteten Überlagerung der EFIE mit der MFIE herrührende *kombinierte Feldintegralgleichung* (CFIE), ableitbar.

<sup>15</sup>Sergei Lvovich Sobolev, 1908–1989, russischer Mathematiker

### 2.2.2.2 Streuprobleme mit ideal elektrisch leitfähigen Schirmen

Streuobjekte, deren Dicke im Vergleich zur Wellenlänge sehr viel kleiner ist und die zudem eine sehr hohe elektrische Leitfähigkeit aufweisen, können mathematisch als unendlich dünner, ideal leitfähiger Schirm modelliert werden. Die direkte Ableitung von Randintegralgleichungen für Schirmprobleme gestaltet sich wegen der vorausgesetzten Annahme einfach zusammenhängender Gebiete jedoch schwieriger. In Anlehnung an GOLDBERG [39] wird zu diesem Zweck der in Abbildung 2.3b) betrachtete Schirm  $S$  um eine imaginäre Fläche  $S_0$  zu einer abgeschlossenen Fläche  $S_1 := S \cup S_0$  ergänzt, so dass diese das Gebiet  $D_+$  umschließt. Durch passende Festlegung der Permittivität  $\varepsilon_I = \varepsilon_{II} = \varepsilon_0$  und Permeabilität  $\mu_I = \mu_{II} = \mu_0$  sowie der einfallenden Welle  $\vec{E}_0 = \vec{E}^{\text{inc}}$  des in Abbildung 2.2 skizzierten Modellproblems ist schließlich der Bezug zu dem hier betrachteten Schirmproblem hergestellt.

Die unterschiedlichen Übergangsbedingungen an den beiden Teilflächen bedingen stückweise definierte Äquivalenzströme. Da die Tangentialkomponenten der elektrischen und magnetischen Feldstärke beim Durchgang durch die Fläche  $S_0$  stetig sein müssen, folgt für die Äquivalenzstromdichten:

$$\vec{K}_I(\vec{r}) = \vec{K}_{II}(\vec{r}), \quad \vec{r} \in S_0, \quad (2.2.41a)$$

$$\vec{M}_I(\vec{r}) = \vec{M}_{II}(\vec{r}), \quad \vec{r} \in S_0. \quad (2.2.41b)$$

Magnetische Flächenströme treten infolge der Randbedingung (2.2.33) auf dem Schirm  $S$  nicht auf:

$$\vec{M}_I(\vec{r}) = \vec{M}_{II}(\vec{r}) = \vec{0}, \quad \vec{r} \in S. \quad (2.2.42)$$

Addition der aus der Darstellungsformel (2.2.23a) hervorgehenden Randintegralgleichung für das Innengebiet

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \vec{M}_{II}(\vec{r}) = \vec{n}(\vec{r}) \times & \left[ \oint_{S_1} (\text{grad}_{\vec{r}'} G)(\vec{r}, \vec{r}') \times \vec{M}_{II}(\vec{r}') dA(\vec{r}') \dots \right. \\ & \left. - jk_0 Z_0 \int_{S_1} G(\vec{r}, \vec{r}') \vec{K}_{II}(\vec{r}') dA(\vec{r}') + \frac{1}{\varepsilon_0} \oint_{S_1} (\text{grad}_{\vec{r}'} G)(\vec{r}, \vec{r}') \underline{\sigma}_{II}(\vec{r}') dA(\vec{r}') \right] \end{aligned} \quad (2.2.43)$$

zu der für das Außengebiet

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \vec{M}_I(\vec{r}) = \vec{n}(\vec{r}) \times & \left[ - \oint_{S_1} (\text{grad}_{\vec{r}'} G)(\vec{r}, \vec{r}') \times \vec{M}_I(\vec{r}') dA(\vec{r}') \dots \right. \\ & \left. + jk_0 Z_0 \int_{S_1} G(\vec{r}, \vec{r}') \vec{K}_I(\vec{r}') dA(\vec{r}') - \frac{1}{\varepsilon_0} \oint_{S_1} (\text{grad}_{\vec{r}'} G)(\vec{r}, \vec{r}') \underline{\sigma}_I(\vec{r}') dA(\vec{r}') - \vec{E}_0(\vec{r}) \right] \end{aligned} \quad (2.2.44)$$

liefert unter Beachtung der Tatsache, dass sich die Teilintegrale über die imaginäre Fläche  $S_0$  aufgrund der Übergangsbedingungen gegenseitig aufheben, eine Randintegralgleichung für die elektrische Oberflächenstromdichte

$$\underline{\vec{K}} := \underline{\vec{K}}_I - \underline{\vec{K}}_{II}, \quad (2.2.45)$$

die von identischem Aufbau wie Gleichung (2.2.37) ist. Gleiche Vorgehensweise führt ausgehend vom FRANZschen Beugungsintegral (2.2.26a) auf die hypersinguläre Integralgleichung (2.2.39) zur Bestimmung der elektrischen Flächenstromdichte in Gleichung (2.2.45).

Im Gegensatz dazu ist es nicht möglich, aus den Darstellungsformeln für die magnetische Feldstärke eine Randintegralgleichung abzuleiten, weil sich die unbekannten Größen nicht auf die Differenz der beiden Flächenstromdichten  $\underline{\vec{K}}_I - \underline{\vec{K}}_{II}$  reduzieren lassen und somit ein unterbestimmtes System vorliegt. Es bleibt festzuhalten, dass Streuprobleme mit offenen Strukturen grundsätzlich nicht mittels Randintegralgleichungen 2. Art modelliert werden können.

Es wurde bereits angedeutet, dass die Gültigkeit der Darstellungsformeln nach STRATTON und CHU in der hier präsentierten Form an gewisse Stetigkeitsbedingungen für die Dichtefunktionen gebunden ist. Konkret ist gefordert, dass die Normalkomponente der Dichtefunktion bezüglich einer beliebigen, auf der Oberfläche verlaufenden Kurve keine Sprünge aufweisen darf. Für die daraus entwickelte Randintegralgleichung (2.2.37) bedeutet dies, dass die Normalkomponente der elektrischen Flächenstromdichte entlang des Randes einer offenen Struktur verschwinden muss. Es stellt sich damit unweigerlich die Frage, ob diese mathematische Voraussetzung auch physikalisch begründet ist, weil andernfalls dieses Modell das reale Problem nicht ausreichend beschreiben würde und folglich passend erweitert werden müsste.

Zur Klärung derartiger Fragestellungen werden häufig kanonische Beispiele herangezogen, für die geschlossene Lösungen gefunden werden können. Ein unendlich ausgedehnter Keil, der aus ideal elektrisch leitfähigem Material besteht, kann beispielsweise als vereinfachtes Modell zur Untersuchung des lokalen Verhaltens elektromagnetischer Feldgrößen an Kanten und Knicken von Streuobjekten dienen. Aus den Ergebnissen dieser Berechnungen kann letztendlich geschlossen werden, dass für spitze Öffnungswinkel die bezüglich der Kante parallele Komponente der Flächenstromdichte und gleichermaßen die Flächenladungsdichte an dieser Stelle singulär werden, wohingegen die Normalkomponente der Flächenstromdichte beschränkt bleibt [67, 92]. Für den hier interessierenden Sonderfall einer unendlich dünnen Platte lässt sich das asymptotische Verhalten der elektrischen Flächenladungsdichte sowie der Flächenstromdichte in Abhängigkeit vom euklidischen Abstand  $r$  zur Kante wie folgt angeben:

$$\sigma = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right), \quad \text{für } r \rightarrow 0, \quad (2.2.46a)$$

$$\underline{\vec{K}} = \vec{t} \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right) + \vec{u} \mathcal{O}(\sqrt{r}), \quad \text{für } r \rightarrow 0. \quad (2.2.46b)$$

Hierin bezeichnet  $\vec{t}$  den Einheitsvektor entlang des Randes der Fläche  $S$  und  $\vec{u} = \vec{t} \times \vec{n}$  den Normaleneinheitsvektor bezüglich dieser Randkurve. Zwar wächst die Flächenladungsdichte bei Annäherung an den Rand der Fläche unbeschränkt an, es tritt jedoch keine

Ladungsakkumulation an der Kante auf, die als Linienladung in Erscheinung treten würde. Damit bleibt die Integralgleichung (2.2.37) mit der Beschränkung auf Flächenstromdichten, deren Normalkomponente auf dem Rand der Fläche verschwindet, auch für offene Strukturen gültig.

### 2.2.2.3 Eigenwertanalyse ideal elektrisch leitfähiger Hohlraumresonatoren

Bekanntlich gibt es bestimmte diskrete Frequenzen, bei denen die mittlere Leistungsaufnahme eines dissipativen, schwingungsfähigen Systems, das monofrequent angeregt wird, einen Maximalwert erreicht. Dieser als Resonanz bezeichnete Effekt wird in technischen Anordnungen wie Beschleunigeranlagen genutzt, um geladene Teilchen durch die damit verbundene Erhöhung der Feldamplituden zu beschleunigen. Sind keine Verluste vorhanden, stimmen die Resonanzfrequenzen mit den Eigenfrequenzen, die das Einschwingverhalten eines Systems charakterisieren, überein. Dies trifft im Allgemeinen nicht für dissipative Systeme zu, weshalb klar zwischen diesen beiden Größen zu unterscheiden ist. Häufig können den zu untersuchenden Hohlraumresonatoren hohe Gütefaktoren und damit sehr geringe Verluste zugeschrieben werden, so dass die Abweichungen der Resonanzfrequenzen von den Eigenfrequenzen für praktische Zwecke vernachlässigt werden können. Damit bietet die Formulierung als mathematisches Eigenwertproblem eine elegante und wesentlich effizientere Möglichkeit zum Auffinden der interessierenden Resonanzfrequenzen.

Neben elektromagnetischen Streuproblemen bilden Eigenwertprobleme homogener Hohlraumresonatoren einen weiteren wichtigen Anwendungszweig von Randintegralgleichungsverfahren. Im Gegensatz zu anderen Verfahren führt deren Einsatz jedoch auf ein indirektes Eigenwertproblem, bei dem in der Eigenwertgleichung eine beliebige, im Allgemeinen nichtlineare Abhängigkeit vom Eigenwertparameter auftritt.

Das vorliegende Problem lässt sich folgendermaßen mathematisch formulieren. Gesucht werden von Null verschiedene elektromagnetische Felder, die sich innerhalb einer ideal leitfähigen, evakuierten Struktur ohne äußere Anregung ausbilden können. Das Material der Gebietsberandung impliziert ein Verschwinden der Tangentialkomponenten der elektrischen Feldstärke, womit ein inneres homogenes Randwertproblem vorliegt. Zur Herstellung des Bezuges zwischen dem in Abbildung 2.3c) grafisch veranschaulichten Eigenwertproblem und dem Modellproblem in Abbildung 2.2 sind die Materialparameter des Problems II gleich denen des Vakuums zu setzen, weiterhin ist ein quellenfreies Innengebiet anzunehmen. Aus den Darstellungsformeln für das Problem II lassen sich schließlich Bestimmungsgleichungen für die elektrischen Flächenstromdichten

$$\vec{K} := \vec{K}_{II} \quad (2.2.47)$$

herleiten, die mit den Randintegralgleichungen (2.2.37)-(2.2.39) für  $\vec{E}^{\text{inc}} = \vec{0}$  exakt übereinstimmen. Zum Auffinden der Eigenmoden sind die Frequenzen und damit die Wellenzahlen zu bestimmen, für die die homogenen Gleichungen nichttriviale Lösungen besitzen.

Aus der Tatsache, dass bei geschlossenen Strukturen die Integraloperatoren sowohl das äußere Streuproblem als auch das innere Eigenwertproblem dieser Struktur mathematisch beschreiben, wird sofort deutlich, dass bei Streuproblemen eine Anregung mit der Eigenfrequenz des zugehörigen Innenraumproblems zu einem nichtleeren Nullraum des Operators führt. Da sich die Eigenschaften der Integraloperatoren auf ihre diskreten Gegenstücke



übertragen, führt dies bei einer Eigenfrequenz auf singuläre oder in der Nähe einer Eigenfrequenz auf schlecht konditionierte Systemmatrizen, womit die Lösung des Gleichungssystems erheblich erschwert wird. Durch geeignete Modifikationen des Modellproblems oder der Randintegralgleichungsformulierung lässt sich jedoch dieser unerwünschte Effekt der inneren Resonanzen sehr effektiv beseitigen [32]. Als Beispiel hierfür ist die bereits erwähnte CFIE-Formulierung zu nennen.

## 2.3 Diskretisierung von Randintegralgleichungen

### 2.3.1 Prinzip der Momentenmethode

Die angegebenen Randintegralgleichungen sind insbesondere bei Vorliegen komplexerer Problemstellungen nicht geschlossen lösbar, weshalb in einem weiteren Schritt versucht werden muss, daraus diskrete Modellgleichungen abzuleiten, die einer rechnergestützten Auswertung zugeführt werden können. Bei geeigneter Wahl des Diskretisierungsverfahrens lässt sich somit eine approximative Lösung erzielen, die in Abhängigkeit von einem Diskretisierungsparameter gegen die exakte Lösung konvergiert. Ein weit verbreitetes Verfahren zur Überführung linearer Operatorgleichungen in algebraische Gleichungssysteme ist die von HARRINGTON vorgeschlagene Momentenmethode [51], die eine Vielzahl spezieller Diskretisierungstechniken in sich vereint. Die enge Verwandtschaft der Momentenmethode mit abstrakten Projektionsverfahren erlaubt eine anschauliche Darlegung des grundlegenden Prinzips mit Hilfe des Konzeptes linearer Funktionenräume und Projektoren.

Ausgangspunkt der folgenden, allgemein gehaltenen Betrachtung ist die zu lösende Gleichung

$$\mathcal{L}x = y, \quad \mathcal{L} : x \mapsto y, \quad \mathcal{L} : X \rightarrow Y \quad (2.3.1)$$

mit einem linearen Operator  $\mathcal{L}$ , der den Funktionenraum  $X$  in eindeutiger Weise auf den Raum  $Y$  abbildet. Des Weiteren wird ein passend gewähltes inneres Produkt<sup>16</sup>  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  angenommen. Die grundlegende Idee besteht darin, eine Sequenz von Projektoren  $P_N$  und  $Q_N$  zu konstruieren, die den Definitions- und Wertebereich des Operators auf geeignete endlichdimensionale Unterräume  $X_N = \text{im}(P_N)$  und  $Y_N = \text{im}(Q_N)$  abbilden, in denen das Problem approximativ gelöst wird. Die Projektoren müssen so gewählt werden, dass sie mit steigender Dimension  $N$  gegen den Einheitsoperator konvergieren.

Im ersten Schritt wird eine Basis für den Unterraum des Definitionsbereiches sowie des Wertebereiches

$$X_N = \text{span} \{f_1, f_2, \dots, f_N\}, \quad (2.3.2a)$$

$$Y_N = \text{span} \{w_1, w_2, \dots, w_N\} \quad (2.3.2b)$$

festgelegt, womit die gesuchte Näherungslösung und die Anregung als gewichtete Überlagerung von linear unabhängigen, nicht notwendigerweise orthogonalen Basisfunktionen

<sup>16</sup>Ein Skalarprodukt ist eine positiv definite, hermitesche Form, die hier als semilinear im ersten und linear im zweiten Argument vorausgesetzt wird.

darstellbar sind:

$$x_N = \sum_{n=1}^N a_n f_n = \kappa_X^{-1} \mathbf{a}, \quad \text{mit: } [\mathbf{a}]_n = a_n, \quad (2.3.3a)$$

$$y_N = \sum_{n=1}^N b_n w_n = \kappa_Y^{-1} \mathbf{b}, \quad \text{mit: } [\mathbf{b}]_n = b_n. \quad (2.3.3b)$$

Im Kontext der Momentenmethode werden Basisfunktionen des Bildbereiches auch als Test- oder Gewichtsfunktionen bezeichnet. Eine explizite Kenntnis sowohl des Projektors  $P_N$  als auch der Koordinatenabbildung  $\kappa_X$  ist nicht zwingend notwendig. Es genügt, dass der durch die gewählte Basis festgelegte Unterraum  $X_N$  den Definitionsbereich  $X$  ausreichend approximiert und diesen im Grenzfall  $N \rightarrow \infty$  vollständig umfasst. Mit der GRAMschen<sup>17</sup> Matrix

$$[\mathbf{G}]_{ij} = \langle w_i, w_j \rangle, \quad (2.3.4)$$

die im Fall der hier vorausgesetzten linear unabhängigen Basisvektoren regulär und wegen der hermiteschen Symmetrie des Skalarproduktes zudem selbstadjungiert ist, sind die Koordinaten der entwickelten Anregung in Gleichung (2.3.3b) zu

$$b_n = \sum_{k=1}^N [\mathbf{G}^{-1}]_{nk} \langle w_k, y_N \rangle = [\kappa_Y y_N]_n \quad (2.3.5)$$

bestimmbar. Aus dieser Koordinatentransformation lässt sich ein Operator der Form

$$Q_N y = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^N [\mathbf{G}^{-1}]_{nk} \langle w_k, y \rangle w_n = \sum_{n=1}^N b_n w_n \quad (2.3.6)$$

ableiten, der, wie leicht gezeigt werden kann, die Eigenschaften eines Orthogonalprojektors besitzt und damit die gesuchte Abbildung in den Unterraum des Bildbereiches  $Y_N$  vermittelt.

Sowohl die als bekannt angenommene Anregung  $y$  als auch das Bild des nunmehr ausschließlich auf den Unterraum  $X_N = \text{im}(P_N)$  wirkenden Operators werden in den Testraum projiziert und anschließend gleichgesetzt, wodurch eine Folge von Gleichungen

$$\mathcal{L}_N x_N = y_N, \quad \text{mit: } \mathcal{L}_N = Q_N \mathcal{L}, \quad y_N = Q_N y \quad (2.3.7)$$

resultiert, die die ursprüngliche Operatorgleichung (2.3.1) approximiert. Das aus den Koordinaten der genäherten Anregungsfunktion gebildete  $N$ -Tupel kann als Element eines im Allgemeinen komplexwertigen Vektorraums  $\mathbb{C}^N$  aufgefasst werden, der isomorph zum gewählten  $N$ -dimensionalen Testraum ist und mit diesem durch die Koordinatenabbildung in Gleichung (2.3.5) in einem eindeutigen Zusammenhang steht. Im Raum der Koordinatenvektoren besitzt der genäherte lineare Operator die Gestalt einer  $N \times N$ -Matrix, womit schließlich eine für die numerische Auswertung auf einer Rechenanlage geeignete Darstellung der genäherten Operatorgleichung

$$\mathbf{L} \mathbf{a} = \mathbf{b}, \quad \text{mit: } \mathbf{L} = \kappa_Y \mathcal{L}_N \kappa_X^{-1}, \quad \mathbf{b} = \kappa_Y y_N \quad (2.3.8)$$

---

<sup>17</sup>Jørgen Pedersen Gram, 1850–1916, dänischer Mathematiker

folgt. Die Bestimmung der Einträge des Anregungsvektors gemäß Gleichung (2.3.6) ist jedoch noch aufwändig und wenig praktikabel. Um möglichst einfache Ausdrücke dafür zu erhalten, bietet sich abschließend eine durch die GRAMSche Matrix vermittelte Basis-Transformation der Systemmatrix an. Dadurch erhält die diskrete Operatorgleichung die endgültige Gestalt

$$\hat{\mathbf{L}} \mathbf{a} = \hat{\mathbf{b}}, \quad \text{mit: } \hat{\mathbf{L}} = \mathbf{G}\mathbf{L}, \quad \hat{\mathbf{b}} = \mathbf{G}\mathbf{b}. \quad (2.3.9)$$

Unter Verwendung der eingeführten Transformationsvorschriften lassen sich die Einträge der Systemmatrix sowie des Anregungsvektors explizit zu

$$[\hat{\mathbf{L}}]_{mn} = \langle w_m, \mathcal{L}f_n \rangle, \quad \hat{\mathbf{L}} \in \mathbb{C}^{N \times N}, \quad (2.3.10a)$$

$$[\hat{\mathbf{b}}]_m = \langle w_m, y \rangle, \quad \hat{\mathbf{b}} \in \mathbb{C}^N. \quad (2.3.10b)$$

angeben.

Die auf die Operatorgleichung angewandte Testprozedur kommt einer Entwicklung der Anregung  $y$  in die gewählten Testfunktionen  $w_m$  mit den Komponenten des Vektors  $\mathbf{b}$  als Entwicklungskoeffizienten gleich. Da diese Basis einen endlichdimensionalen Unterraum aufspannt, stellt das Ergebnis für gewöhnlich eine Approximation der ursprünglichen Funktion dar. Der transformierte Vektor  $\hat{\mathbf{b}}$  enthält die Koordinaten der Entwicklung bezüglich der reziproken Basis  $\hat{w}$

$$y_N = \sum_{n=1}^N \hat{b}_n \hat{w}_n, \quad \text{mit: } \hat{w}_n = \sum_{i=1}^N [\mathbf{G}^{-1}]_{in} w_i, \quad (2.3.11)$$

zu dessen Bestimmung jedoch die ursprünglichen Basisfunktionen herangezogen werden. Beide Formulierungen repräsentieren das gleiche diskrete Problem in unterschiedlichen Basen desselben Unterraums, weshalb sie vollkommen äquivalent zueinander sind. Bei einer praktischen Realisierung der Momentenmethode kann demzufolge die Anregung von vornherein in die reziproke Basis entwickelt und somit auf die wesentlich einfachere Darstellungsform in Gleichung (2.3.9) zurückgegriffen werden.

Die erläuterten Zusammenhänge zwischen den einzelnen diskreten Funktionenräumen können dem folgenden kommutativen Diagramm entnommen werden:

$$\begin{array}{ccccc}
 x_N \in X_N & \xleftarrow{\kappa_X} & \mathbf{a} \in \mathbb{C}^N & \xrightleftharpoons[\mathbf{I}]{\mathbf{I}} & \mathbf{a} \in \mathbb{C}^N \\
 \uparrow \mathcal{L}_N^{-1} \quad \downarrow \mathcal{L}_N & & \uparrow \mathbf{L}^{-1} \quad \downarrow \mathbf{L} & & \uparrow \hat{\mathbf{L}}^{-1} \quad \downarrow \hat{\mathbf{L}} \\
 y_N \in Y_N & \xrightleftharpoons[\kappa_Y^{-1}]{\kappa_Y} & \mathbf{b} \in \mathbb{C}^N & \xrightleftharpoons[\mathbf{G}^{-1}]{\mathbf{G}} & \hat{\mathbf{b}} \in \mathbb{C}^N
 \end{array}$$

Entscheidend für die Eignung der Näherungsfolge nach Gleichung (2.3.7) ist die sorgfältige Wahl der Basis- und Gewichtsfunktionen, die von den Abbildungseigenschaften des linearen Operators und den zugrunde gelegten Funktionenräumen abhängt. Wenn die diskreten Operatoren für eine beliebige Dimension der Unterräume invertierbar sind, so dass dem Verfahren die Eigenschaft der Stabilität zugeschrieben werden kann, und das Verfahren zudem konsistent ist, dann ist die Konvergenz der Näherungslösung gegen die

exakte Lösung gewährleistet. Unter Konsistenz ist dabei zu verstehen, dass der genäherte Operator im Grenzfalle  $N \rightarrow \infty$  gegen den exakten Operator strebt. Nicht nur die Frage nach der Konvergenz an sich, sondern auch nach deren Geschwindigkeit ist von großem Interesse, worauf hier aber nicht näher eingegangen werden soll. In zahlreichen, vorrangig mathematisch orientierten Publikationen und Monografien finden sich theoretische Abhandlungen über Auswahlkriterien zu Ansatzräumen sowie Untersuchungen zu den Konvergenzeigenschaften der Momentenmethode [77, 24, 54, 76].

Abhängig von der Festlegung der Unterräume ergeben sich bestimmte Spezialisierungen der Momentenmethode [49]. Stimmen Definitions- und Bildbereich überein, führt die Wahl identischer Basisfunktionen in beiden Räumen auf das sogenannte GALERKIN<sup>18</sup>-Verfahren, das insbesondere zur Diskretisierung selbstadjungierter Operatoren geeignet ist. Bei der Kollokationsmethode werden die Funktionen im Bildbereich mittels DIRACScher Deltadistributionen an fest vorgegebenen Stellen abgetastet. Auch die Methode der kleinsten Quadrate geht als Sonderfall aus der Momentenmethode hervor, wenn als Gewichtsfunktionen gerade die Bilder der Basisfunktionen aus dem Definitionsbereich herangezogen werden.

### 2.3.2 Approximation der Geometrie

Aufgrund ihrer Einfachheit und hohen Flexibilität haben sich in der praktischen Anwendung der Momentenmethode lokale Basisfunktionen etabliert. Diese besitzen im Gegensatz zu globalen Ansätzen einen kompakten Träger, womit eine Zerlegung der Geometrie in eine entsprechende Anzahl elementarer Figuren, deren Vereinigung die Struktur exakt oder auch approximativ nachbildet, unabdingbar ist. Geradlinig berandete, ebene Dreiecke sind die einfachsten Elemente zur näherungsweisen Beschreibung beliebig gekrümmter Oberflächen und werden deshalb bevorzugt eingesetzt. Bezeichnet  $T_k$  ein derartiges Dreieck, so bildet das Gitter

$$\tilde{S} = \bigcup_{k=1}^{N_T} T_k \quad (2.3.12)$$

eine Approximation des Integrationsgebietes  $S$ , wenn vorausgesetzt wird, dass die Eckpunkte der Dreiecke Elemente der Fläche  $S$  sind, das Gitter  $\tilde{S}$  regulär<sup>19</sup> ist und das Gebiet  $S$  überdeckt. Ein Ausschnitt einer triangulierten Oberfläche mit den verwendeten Bezeichnungen aller auftretenden Simplicia ist in Abbildung 2.4 gezeigt. Kanten und Dreiecke können dabei mit einer entsprechenden Orientierung versehen sein.

Die Auswahl der Schrittweite und damit die Feinheit der Diskretisierung hängt im Wesentlichen von zwei Faktoren ab. Zum einen sollte die Geometrie des Streuobjekts selbst fein genug aufgelöst werden, damit keine geometrischen Einzelheiten verloren gehen. Zugleich müssen die Flächenstromdichten hinreichend gut nachgebildet werden, womit die maximale Gitterschrittweite durch die kürzeste Wellenlänge beschränkt ist. Für Konvergenzuntersuchungen und Fehlerabschätzungen wird zur Beschreibung der Feinheit eines

<sup>18</sup>Boris Grigorjewitsch Galerkin, 1871–1945, sowjetischer Ingenieur und Mathematiker

<sup>19</sup>Ein reguläre Triangulierung der Oberfläche liegt vor, wenn der Durchschnitt von zwei verschiedenen Elementen entweder leer, ein Punkt  $P_i$  oder eine Kante  $E_j$  ist [77].

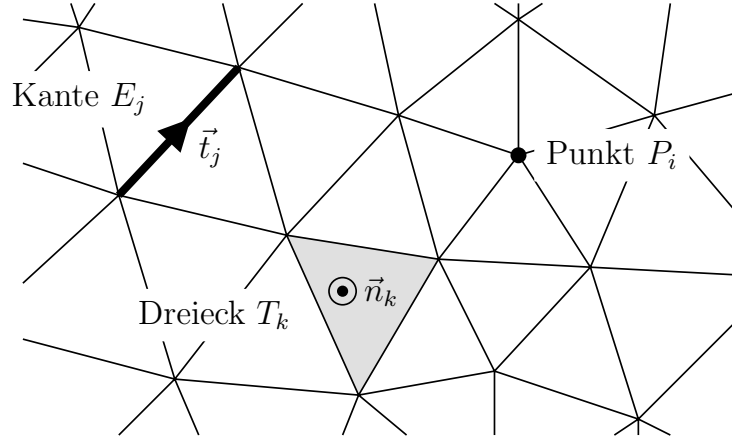


Abbildung 2.4: Ausschnitt eines regulären Dreiecksgitters zur Repräsentation der Oberfläche von Streukörpern. Punkte  $P_i$ , Kanten  $E_j$  und Dreiecke  $T_k$  bilden die Grundbausteine des Gitters. Die Orientierung der Kanten ist durch den Tangenteneinheitsvektor  $\vec{t}_j$ , die der Dreiecke durch den Normaleneinheitsvektor  $\vec{n}_k$  festgelegt.

Gitters ein Diskretisierungsparameter eingeführt, der häufig als Maximum der Durchmesser aller Dreiecke

$$h = \max\{h_k : k \in \{1, 2, \dots, N_T\}\}, \quad \text{mit: } h_k := \sup_{\vec{r}, \vec{r}' \in T_k} \|\vec{r} - \vec{r}'\| \quad (2.3.13)$$

gewählt und als Gitterschrittweite oder Maschenweite bezeichnet wird [77].

Spitzwinklige Dreiecke setzen die Genauigkeit des Diskretisierungsverfahrens herab und können zudem große numerische Fehler verursachen, weshalb solche verzerrten Geometrien vermieden werden sollten. Ein ideales Gitter setzt sich demzufolge aus gleichseitigen Dreiecken zusammen. Zur quantitativen Erfassung der Güte einer Triangulierung, die die Abweichung von einem regelmäßigen Gitter angibt, werden deshalb geeignete Maße definiert [77].

### 2.3.3 Elektrische Feldintegralgleichung

Nachfolgend wird eine diskrete Form der elektrischen Feldintegralgleichung (2.2.37) mit Hilfe der im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Momentenmethode systematisch hergeleitet. Es wurde bereits erwähnt, dass geeignete Funktionenräume zu definieren sind, um ein wohlgestelltes Problem mit physikalisch sinnvollen Lösungen zu erhalten. Es kann gezeigt werden, dass unter der Annahme glatter Oberflächen sowohl die elektrische Flächenstromdichte als auch die daraus abgeleitete elektrische Flächenladungsdichte in einem bestimmten Raum zu suchen sind, der kleiner als jener der quadratintegrierbaren Funktionen ist und an dieser Stelle als bekannt vorausgesetzt wird [54]. Diese Annahme gilt ebenfalls für offene Flächen und impliziert die notwendige Forderung nach der Stetigkeit der Normalkomponente der elektrischen Flächenstromdichte bezüglich einer beliebigen Kurve auf der Fläche.

Aufgrund ihrer bemerkenswerten Eigenschaften in Bezug auf Stetigkeit und Ladungserhaltung eignen sich insbesondere die Vektorfunktionen

$$\vec{f}_n(\vec{r}) = \vec{f}_n^+(\vec{r}) + \vec{f}_n^-(\vec{r}), \quad \text{mit: } \vec{f}_n^\pm(\vec{r}) = \begin{cases} \pm \frac{l_n}{2A_n^\pm}(\vec{r} - \vec{r}_n^\pm) & ; \vec{r} \in T_n^\pm \\ 0 & ; \vec{r} \notin T_n^\pm \end{cases} \quad (2.3.14)$$

als Basis für einen diskreten Unterraum, die im Jahr 1982 von RAO, WILTON und GLISSON vorgeschlagen wurden und eine weite Verbreitung in der Randelementmethode gefunden haben [72]. In Abbildung 2.5 ist das Vektorfeld dieser Basisfunktionen grafisch dargestellt sowie die verwendete Notation für die Geometrie Größen angegeben. Diese Basis ermöglicht die exakte Darstellung tangentialer Vektorfelder mit konstanter Amplitude. Jeder inneren Kante  $E_n$  des Oberflächengitters ist eine Teilbereichsfunktion zugeordnet, deren kompakter Träger sich über die beiden korrespondierenden Dreiecke erstreckt. Bei Vorliegen einer offenen Fläche werden die Kanten entlang des Randes ausgeschlossen. Gemäß der in Gleichung (2.3.14) angegebenen Definition wird der von Dreieck  $T_n^+$  nach Dreieck  $T_n^-$  fließende Strom positiv gezählt, wobei die Festlegung dieser beiden Dreiecke grundsätzlich willkürlich erfolgen kann. Eine eventuell vorhandene Orientierung der Elementarfiguren ist dabei ohne Belang. Es erweist sich jedoch bei der Implementierung auf einer Rechanlage als vorteilhaft, diese mit der Zählrichtung des Stromes zu identifizieren.

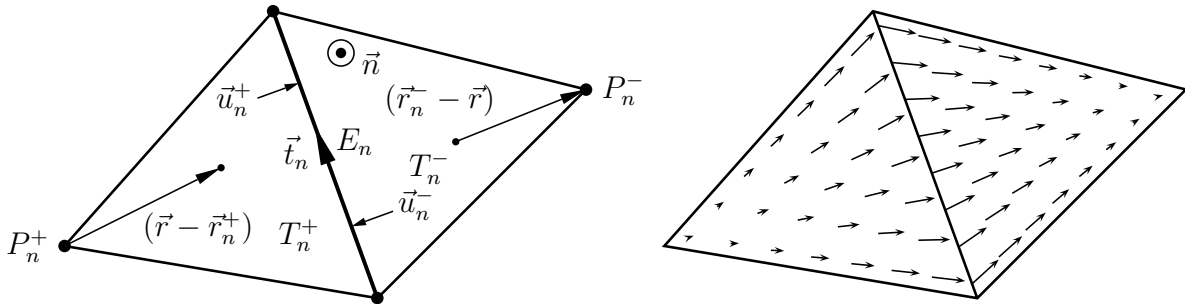


Abbildung 2.5: *Kantenelemente nach Rao, Wilton und Glisson. Festlegung der zu einer Ansatzfunktion gehörenden lokalen geometrischen Kenngrößen.*

Die Größe  $A_n^\pm$  steht dabei für den Flächeninhalt des Dreiecks  $T_n^\pm$ , die Länge der Kante  $E_n$  wird mit  $l_n$  bezeichnet. Dieses Tangentialfeld ist proportional zur Differenz zwischen Aufpunkt  $\vec{r}$  und freiem Eckpunkt  $\vec{r}_n^\pm$ , woraus deutlich wird, dass das Vektorfeld am Rand des Trägers nur eine Tangentialkomponente mit linearer Ortsabhängigkeit besitzt. Entlang der gemeinsamen Kante besitzt die Normalkomponente der RWG-Funktion einen konstanten Wert und verläuft stetig beim Übergang von Dreieck  $T_n^+$  nach  $T_n^-$ . Da diese in der obigen Definition normiert ist, lassen sich die Koeffizienten in dem Ansatz

$$\vec{\tilde{K}}(\vec{r}) = \sum_{n=1}^N \underline{l}_n \vec{f}_n(\vec{r}) \quad (2.3.15)$$

als Anteile der genäherten Flächenstromdichte normal zur Kante  $E_n$  deuten. Damit repräsentiert der Ausdruck  $\underline{l}_n = \underline{l}_n l_n$  den durch die Kante  $E_n$  fließenden Gesamtstrom. Der

notwendigen Forderung nach dem Verschwinden der Normalkomponente der elektrischen Flächenstromdichte am Rand offener Flächen wird durch Verwendung dieser Ansatzfunktionen unmittelbar Rechnung getragen.

Durch Bildung der Oberflächendivergenz  $\text{Div } \vec{\tilde{K}} = -j\omega\tilde{\sigma}$  erhält man eine Entwicklung der Flächenladungsdichte

$$\tilde{\sigma} = \frac{j}{\omega} \sum_{n=1}^N \tilde{l}_n \text{Div } \vec{f}_n, \quad \text{mit: } \text{Div } \vec{f}_n^\pm(\vec{r}) = \begin{cases} \pm \frac{l_n}{A_n^\pm} & ; \vec{r} \in T_n^\pm \\ 0 & ; \vec{r} \notin T_n^\pm \end{cases} \quad (2.3.16)$$

in stückweise konstante Funktionen. Aus Gleichung (2.3.16) ist leicht erkennbar, dass die mit jeder einzelnen Ansatzfunktion verknüpfte Gesamtladung identisch verschwindet, womit sich auch erwartungsgemäß die Eigenschaft der Ladungserhaltung auf den Ansatzraum überträgt. Im weiteren Verlauf wird aus Gründen einer einfacheren Darstellung die Abkürzung  $l_n^\pm := \pm l_n$  eingeführt.

Es soll an dieser Stelle darauf hingewiesen werden, dass die bisherigen Betrachtungen streng genommen nur für glatte, geschlossene Oberflächen gelten. An scharfen Kanten und insbesondere an den Rändern offener Strukturen wachsen bekanntlich die Tangentialkomponenten der Flächenstromdichte unbeschränkt an, womit sich die Frage nach einer hinreichenden Approximationsgüte der RWG-Funktionen neu stellt. Auch wenn es möglicherweise zu erheblichen lokalen Fehlern in den Feldgrößen kommt, hat sich in der Rechenpraxis gezeigt, dass für die interessierenden integralen Größen, wie beispielsweise für den Radarquerschnitt, die Verwendung dieser Basis in den meisten Fällen vollkommen ausreichend ist. Besteht jedoch primäres Interesse an der Untersuchung lokaler Feldgrößen in der Nähe derartiger Kanten, sind spezielle Vektorbasisfunktionen vorzuziehen, die dieses singuläre Verhalten in geeigneter Weise abbilden [41].

Zur Diskretisierung der elektrischen Feldintegralgleichung wird die schiefsymmetrische Sesquilinearform

$$\langle \vec{u}_m, \vec{g} \rangle := \int_S \vec{u}_m^* \cdot (\vec{g} \times \vec{n}) dA \quad (2.3.17)$$

herangezogen und die Testfunktionen  $\vec{u}_m$  gleich den reellwertigen Basisfunktionen  $\vec{f}_m$  gewählt, woraus das bereits erwähnte GALERKIN-Verfahren resultiert.

Wegen des kompakten Trägers der Testfunktionen kann zur Aufstellung des Anregungsvektors das Integrationsgebiet auf die beiden Dreieckselemente  $T_m^\pm$  eingeschränkt werden, die getrennt voneinander betrachtet werden können. Nach Einsetzen der rechten Seite von Gleichung (2.2.37) in Gleichung (2.3.17) folgt unter Verwendung elementarer vektoralgebraischer Zusammenhänge für die beiden Anteile des Integrals

$$u_m^\pm = E_0 \frac{l_m^\pm}{2A_m^\pm} \int_{T_m^\pm} [\vec{p}_i + jv(\vec{p}_i \times \vec{n}_i)] \cdot (\vec{r} - \vec{r}_m^\pm) \exp(-jk_0 \vec{n}_i \cdot \vec{r}) dA(\vec{r}), \quad (2.3.18)$$

woraus sich schließlich die gesuchten Koeffizienten des Anregungsvektors gemäß

$$\underline{u}_m = \underline{u}_m^+ + \underline{u}_m^- \quad (2.3.19)$$

zusammensetzen.

Für die Beiträge zur Impedanzmatrix ergibt sich nach Vertauschen der Integrationsgrenzen ein Ausdruck der Form

$$\begin{aligned} \underline{Z}_{mn} = jk_0 Z_0 \left\{ \int_S \int_S \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') \vec{f}_m(\vec{r}) \cdot \vec{f}_n(\vec{r}') dA(\vec{r}') dA(\vec{r}) \dots \right. \\ \left. - \frac{1}{k_0^2} \int_S \left[ \int_S (\text{grad}_{\vec{r}'} \underline{G})(\vec{r}, \vec{r}') \cdot \vec{f}_m(\vec{r}) dA(\vec{r}) \right] (\text{Div } \vec{f}_n)(\vec{r}') dA(\vec{r}') \right\}. \end{aligned} \quad (2.3.20)$$

Für weitere Umformungen erweist es sich an dieser Stelle als überaus vorteilhaft, explizit auf die Formulierung für auf Oberflächen definierte Feldgrößen überzugehen. Mit der Beziehung (C.1.12a) aus Anhang C.1 folgt unter Beachtung der Eigenschaft  $\vec{n} \cdot \vec{f}_m = 0$  und unter Einbeziehung der leicht nachprüfaren Identität

$$\text{grad}_{\vec{r}'} \underline{G} = -\text{grad}_{\vec{r}} \underline{G}, \quad (2.3.21)$$

dass der Gradient durch sein Oberflächenäquivalent ersetzbar ist:

$$\text{grad}_{\vec{r}'} \underline{G} \cdot \vec{f}_m = -\text{Grad}_{\vec{r}} \underline{G} \cdot \vec{f}_m. \quad (2.3.22)$$

Ausnutzung der vektoranalytischen Identität (C.1.15) liefert für das innere Integral des letzten Terms in Gleichung (2.3.20) mit der Festlegung  $(\underline{G} \vec{f}_m)(\vec{r}, \vec{r}') := \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') \vec{f}_m(\vec{r})$  einen Ausdruck der Form

$$\int_S (\text{grad}_{\vec{r}'} \underline{G})(\vec{r}, \vec{r}') \cdot \vec{f}_m(\vec{r}) dA(\vec{r}) = - \int_S \left[ \text{Div}_{\vec{r}} (\underline{G} \vec{f}_m)(\vec{r}, \vec{r}') - \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') (\text{Div } \vec{f}_m)(\vec{r}) \right] dA(\vec{r}). \quad (2.3.23)$$

Das nach Anwendung des GAUSSschen<sup>20</sup> Satzes für Oberflächen (C.1.14) auftretende Randintegral besitzt wegen des Verschwindens der Normalkomponente der Basisfunktionen bezüglich des Randes von  $T_m^+ \cup T_m^-$  den Wert Null, womit das Integral in Gleichung (2.3.23) die Gestalt

$$\int_S (\text{grad}_{\vec{r}'} \underline{G})(\vec{r}, \vec{r}') \cdot \vec{f}_m(\vec{r}) dA(\vec{r}) = \int_S \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') (\text{Div } \vec{f}_m)(\vec{r}) dA(\vec{r}) \quad (2.3.24)$$

annimmt. Das Integrationsgebiet sowohl des inneren als auch des äußeren Integrals in Gleichung (2.3.20) besteht aus zwei disjunkten Dreiecksflächen, womit sich die Matrixbeiträge aus vier Anteilen

$$\underline{Z}_{mn} = \underline{Z}_{mn}^{++} + \underline{Z}_{mn}^{+-} + \underline{Z}_{mn}^{-+} + \underline{Z}_{mn}^{--} \quad (2.3.25)$$

zusammensetzen, die den Aufbau

$$\underline{Z}_{mn}^{\pm\pm} = jk_0 Z_0 \frac{l_m^\pm l_n^\pm}{4A_m^\pm A_n^\pm} \int_{T_m^\pm} \int_{T_n^\pm} \left[ (\vec{r} - \vec{r}_m^\pm) \cdot (\vec{r}' - \vec{r}_n^\pm) - \frac{4}{k_0^2} \right] \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') dA(\vec{r}') dA(\vec{r}). \quad (2.3.26)$$

besitzen. Damit lässt sich die diskretisierte Integralgleichung in der Matrixform

$$\underline{\mathbf{Z}} \underline{\mathbf{i}} = \underline{\mathbf{u}} \quad (2.3.27)$$

ausdrücken. Unter der Voraussetzung, dass die Wellenzahl der Anregung mit keiner inneren Resonanz zusammenfällt, ist dieses lineare Gleichungssystem eindeutig lösbar.

<sup>20</sup>Johann Carl Friedrich Gauß, 1777–1855, deutscher Mathematiker, Astronom, Geodät und Physiker



## 2.4 Berechnung der Matrixbeiträge

### 2.4.1 Numerische Integration

Zur Aufstellung der Systemmatrix sowie des Anregungsvektors ist die Integration von skalar- und vektorwertigen Funktionen über bestimmte Gebiete unumgänglich. Die in den Integraloperatoren auftretende Fundamentallösung des HELMHOLTZ-Operators lässt jedoch im Allgemeinen keine analytische Berechnung der Koeffizienten der Systemmatrix zu, ebenso ist die exakte Aufbereitung des Anregungsvektors nur in wenigen Spezialfällen durchführbar. Selbst wenn eine analytische Lösung erreicht werden kann, ist oftmals eine numerische Auswertung unter Einsatz eines passenden Verfahrens vorteilhafter, weil einerseits der durch die numerische Integration bedingte Fehler so klein gehalten werden kann, dass er einen nur unwesentlichen Einfluss auf die Genauigkeit des gesamten Verfahrens hat, und andererseits der Rechenaufwand deutlich niedriger ist als der zur Auswertung der analytischen Ausdrücke.

Von großer Bedeutung in der Randelementmethode ist daher die sorgfältige Auswahl des zur Berechnung der diskreten Operatoren und Anregungsvektoren eingesetzten Quadraturverfahrens, welchem zum einen hinreichende Genauigkeit und eine bestimmte Konvergenzordnung abverlangt wird, um die Auswirkung des Quadraturfehlers auf das Diskretisierungsverfahren so gering wie möglich zu halten, und welches zum anderen schnell, robust und effizient sein soll, damit nicht der Aufwand zur Aufstellung der im Allgemeinen vollbesetzten Systemmatrix das Gesamtverfahren dominiert. Unter Effizienz in Zusammenhang mit Quadraturformeln ist dabei das Erreichen einer vorgegebenen Genauigkeit mit minimalem Aufwand, d.h. mit geringst möglicher Anzahl von Quadraturpunkten und damit Funktionsauswertungen, zu verstehen.

In der Randelementmethode haben sich GAUSS-Quadraturformeln etabliert, da diese unter allen numerischen Integrationsmethoden den maximalen Exaktheitsgrad besitzen und zusätzlich numerisch stabil sind [94]. GAUSS-Quadraturen basieren auf der Idee, durch eine geeignete Anzahl sowie passende Wahl von Stützstellen eine Näherungsformel der Form

$$\int_{\Omega} w(\vec{r}) f(\vec{r}) d\Omega(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N w_i f(\vec{r}_i) + R_{\Omega}(f) = Q_{\Omega}(f) + R_{\Omega}(f) \quad (2.4.1)$$

zu konstruieren, die Polynome bis zu einem gewünschten Grad  $p$  exakt integriert. Ein Nachteil ist, dass die Punkte, an denen die zu integrierende Funktion  $f$  ausgewertet werden muss, nicht beliebig wählbar sondern durch das Verfahren fest vorgegeben sind. Da jedoch in der Randelementmethode die Integranden in Form einer Rechenvorschrift vorliegen, spielt diese Einschränkung keine Rolle. Demgegenüber steht der entscheidende Vorteil einer optimalen Ordnung, weil die Festlegung der Quadraturpunkte selbst als zusätzliche Freiheitsgrade eingehen. Abhängig von der Gewichtsfunktion  $w$  resultieren verschiedene Varianten der GAUSS-Quadratur. Bei entsprechender Wahl können die Quadraturformeln sogar zur Berechnung uneigentlicher Integrale ausgelegt werden. Allerdings ist dann unter Umständen die Bestimmung der Stützstellen  $x_i$  und Gewichte  $w_i$  mit erheblichem Aufwand verbunden. Unter gewissen Regularitätsvoraussetzungen an den Integranden konvergieren GAUSS-Quadraturen mit der Ordnung  $R_{\Omega} = \mathcal{O}(h^{p+1})$ , wenn  $R_{\Omega}$  den Quadraturfehler und  $h$  den Diskretisierungsparameter symbolisieren.

Im weiteren Verlauf wird das Hauptaugenmerk auf die aus der Festlegung einer konstanten Gewichtsfunktion  $w(\vec{r}) = 1$  resultierenden gewöhnlichen GAUSS-Quadraturverfahren gerichtet, da die in der BEM auftretenden Integrale ein beschränktes Integrationsgebiet besitzen und entweder von vornherein hinreichend regulär sind oder durch spezielle Verfahren, auf die im folgenden Abschnitt eingegangen wird, regularisiert werden können.

Für die Berechnung der Elementbeiträge in der BEM werden im Allgemeinen mehrdimensionale Quadraturformeln benötigt, die auf verschiedene Weise entwickelt werden können. Eine Möglichkeit besteht in der wiederholten Ausführung eindimensionaler Quadraturregeln, woraus sogenannte Produktformeln hervorgehen [77, 94]. Ausgehend von der GAUSS-LEGENDRE<sup>21</sup>-Quadratur

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = Q(f) + R(f) = \sum_{i=1}^N w_i f(x_i) + R(f), \quad (2.4.2)$$

die für  $N$  Punkte den Exaktheitsgrad

$$p = 2N - 1 \quad (2.4.3)$$

aufweist und deren Stützstellen gerade den Nullstellen der LEGENDRE-Polynome erster Art entsprechen, gestattet die iterierte Anwendung des Quadraturoperators  $Q$  auf eine Funktion in mehreren Veränderlichen

$$Q^\nu(f) = \sum_{i_1}^{N_1} \sum_{i_2}^{N_2} \dots \sum_{i_\nu}^{N_\nu} w_{i_1} w_{i_2} \dots w_{i_\nu} f[x_1(i_1), x_2(i_2), \dots, x_\nu(i_\nu)] \quad (2.4.4)$$

eine näherungsweise Berechnung von Integralen über den  $\nu$ -dimensionalen Hyperwürfel

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \dots \int_{-1}^1 f(x_1, x_2, \dots, x_\nu) dx_1 dx_2 \dots dx_\nu = Q^\nu(f) + R^\nu(f). \quad (2.4.5)$$

Grundsätzlich können bei dieser verschachtelten Quadratur unterschiedliche Stützstellenzahlen  $N_\mu$  gewählt werden. Da jedoch der maximal erreichbare Polynomgrad gleich dem Minimum der einzelnen Polynomgrade ist und demzufolge die Konvergenzordnung des Gesamtverfahrens nicht höher als die des Anteils mit der geringsten Ordnung sein kann, führt die Wahl identischer Polynomordnungen auf die effizienteste Variante. Von Bedeutung sind die somit erhaltenen Tensor-GAUSS-Quadraturformeln für die Berechnung der im nächsten Abschnitt behandelten regularisierten Integrale.

Quadraturformeln auf Basis von Tensorprodukten sind bekanntlich nicht von optimaler Ordnung, weshalb alternativ versucht werden kann, das Konzept zur Aufstellung eindimensionaler Quadraturformeln konsequent auf mehrdimensionale Integrale zu übertragen. Im Gegensatz zum eindimensionalen Fall gestaltet sich die Bestimmung der Quadraturpunkte für mehrdimensionale Integrale erheblich schwieriger und war deshalb lange Zeit Anlass zu intensiver Forschung sowie der Weiterentwicklung speziell von effizienten Quadraturregeln über Dreiecke und Tetraeder mit schwerpunktmäßiger Anwendung in der

<sup>21</sup>Adrien-Marie Legendre, 1752–1833, französischer Mathematiker

BEM und FEM [31, 29]. In diesem Zusammenhang sei darauf hingewiesen, dass ein ebenes Dreieck im Raum stets durch eine Transformation auf ein gleichseitiges Dreieck abgebildet werden kann, welches die Symmetrie der Diedergruppe  $D_3$  besitzt, womit sich zum Auffinden von symmetrischen Quadraturformeln auf dreieckigen Integrationsgebieten der Methoden aus der Gruppentheorie bedient werden kann [63].

Zunächst wird ein reguläres Integral über ein ebenes, dreieckförmiges Gebiet, wie es zum Beispiel bei der Berechnung der Beiträge für den Anregungsvektor in Gleichung (2.3.18) auftritt, betrachtet. Nach Transformation auf das Einheitsdreieck

$$\vec{r} = \vec{r}_1 + (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)\eta + (\vec{r}_3 - \vec{r}_1)\xi, \quad 0 \leq \eta \leq 1, \quad 0 \leq \xi \leq 1 - \eta, \quad (2.4.6)$$

wobei die Vektoren  $\vec{r}_i$  mit  $i \in [1, 3]$  die Eckpunkte des Dreiecks bezeichnen, lässt sich das Integral unter Berücksichtigung des differentiellen Flächenelementes  $dA(\vec{r}) = 2A_m^\pm d\eta d\xi$  näherungsweise wie folgt berechnen:

$$Q_\Delta(f) = 2A_m^\pm \sum_{i=1}^N w_i f[\vec{r}(\eta_i, \xi_i)]. \quad (2.4.7)$$

Hierin steht die Funktion  $f$  stellvertretend für den Integranden in Gleichung (2.3.18). Die benötigten Werte für die Stützstellen und Gewichte können beispielsweise der Literatur entnommen werden. Eine sehr übersichtliche Zusammenstellung sowie ein Computeralgorithmus zur Generierung dieser Größen wurde von DUNAVANT [31] publiziert. Die näherungsweise Bestimmung der Beiträge zur Systemmatrix in Gleichung (2.3.20), bei denen der Abstand zwischen den Trägern der Ansatz- und Testfunktionen hinreichend groß ist, erfolgt durch wiederholte Anwendung des eingeführten Quadraturoperators  $Q_\Delta$  aus Gleichung (2.4.7) auf die Integrandenfunktion, die abkürzend mit  $g$  bezeichnet werden soll:

$$Q_\Delta^2(g) = 4A_m^\pm A_n^\pm \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^N w_i w_k g[\vec{r}(\eta_i, \xi_i), \vec{r}'(\eta_k, \xi_k)]. \quad (2.4.8)$$

Anzumerken ist, dass mit Hilfe einer bilinearen Transformation das Einheitsdreieck auf das Einheitsquadrat abgebildet werden kann und somit alternativ auch die Tensor-GAUSS-Quadratur anwendbar ist. Von Vorteil wäre zweifellos die wesentlich einfachere Bestimmung der Stützstellen und Gewichte. Entscheidender Nachteil dieser Vorgehensweise ist jedoch die weitaus geringere Effizienz verglichen mit der direkten Methode.

Polynomgrad $p$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
GAUSS-Quadratur $Q_\Delta$	1	3	4	6	7	12	13	16	19	25	27	33
Produktregel $Q^2$	1	4	4	9	9	16	16	25	25	36	36	49

Tabelle 2.1: Zusammenhang zwischen Exaktheitsgrad und der dazu erforderlichen Anzahl von Quadraturpunkten für unterschiedliche Varianten der zweidimensionalen Quadratur. Für eine fest vorgegebene Stützstellenzahl weist die direkte Quadraturregel über das Einheitsdreieck im Gegensatz zur Produktregel eine höhere Ordnung auf.

Die zum Erreichen einer bestimmten Polynomordnung benötigte Anzahl von Quadraturpunkten bei Verwendung symmetrischer Quadraturformeln für das Einheitsdreieck mit

ausschließlich inneren Punkten kann Tabelle 2.1 entnommen werden [31]. Zum Vergleich sind zusätzlich die für die zweidimensionale Tensor-GAUSS-Quadratur benötigten Stützstellenzahlen angegeben.

### 2.4.2 Behandlung singulärer Integrale

Die im vorangegangenen Abschnitt eingeführten Quadraturformeln eignen sich hervorragend zur approximativen Lösung von Integralen mit hinreichend regulärem Integranden. Typischerweise wachsen die Kernfunktionen in der BEM bei Annäherung des Aufpunktes an den Quellpunkt unbeschränkt an, wodurch bei der Berechnung bestimmter Beiträge zum diskreten Integraloperator die Voraussetzungen für die Anwendbarkeit dieser Verfahren verletzt sind. Bleibt das singuläre Verhalten des Integranden bei der numerischen Integration unberücksichtigt, kann es zum Verlust der zu erwartenden Konvergenzordnung oder gar zum völligen Versagen des Quadraturverfahrens kommen. Folgende Fälle sind bei der Berechnung der Beiträge zur Systemmatrix zu unterscheiden:

- Dreiecke mit gemeinsamem Punkt,
- Dreiecke mit gemeinsamer Kante,
- identische Dreiecke,
- Dreiecke mit geringem Abstand.

Auch wenn die im letzten Punkt genannten Integrale regulär und somit mittels Standard-Quadraturen auswertbar sind, können Quasi-Singularitäten, die bei der Interaktion von nahe beieinander liegenden Elementen auftreten, zu einer drastischen Verschlechterung des Konvergenzverhaltens des Quadraturverfahrens führen. Zwar bleibt in diesem Fall die asymptotische Konvergenzordnung davon unberührt, diese stellt sich aber unter Umständen erst für sehr kleine Schrittweiten ein. Zusätzlich kann es zu einem erheblichen Genauigkeitsverlust kommen, so dass nur mit einem deutlichen Mehraufwand brauchbare Ergebnisse erzielt werden können. Da die zur Regularisierung von singulären Integralen eingesetzten Methoden ebenfalls zur Glättung von Quasi-Singularitäten geeignet sind, soll dieser Fall mit einbezogen werden.

Zur Behandlung derartiger Integrale gibt es eine Vielzahl von möglichen Vorgehensweisen, aus denen sich in der Randelementmethode zwei Techniken durchgesetzt haben, die auch im Anschluss kurz vorgestellt und im Hinblick auf ihre Leistungsfähigkeit näher untersucht werden. Zu erwähnen sei noch die Möglichkeit, eine angepasste Quadraturregel zu entwickeln, indem durch geeignete Wahl der Gewichtsfunktion die Singularität eliminiert wird. Das Auffinden der zugehörigen Stützstellen und Gewichte stößt jedoch schnell an die Grenzen der Realisierbarkeit, weshalb dieses Konzept für die hier betrachtete Randintegralgleichungsformulierung ohne Bedeutung ist.

#### 2.4.2.1 Extraktion der Singularität

Dieser Methode liegt die Idee zugrunde, den singulären Anteil vom Integranden zu subtrahieren, um so das Integral einer numerischen Auswertung zugänglich zu machen. Voraus-

setzung hierfür ist die Existenz einer geschlossenen Lösung für das Integral des abgespaltenen singulären Terms, welches anschließend zum regularisierten Anteil aufaddiert werden muss. Als wesentlicher Vorteil dieser Regularisierungstechnik ist die uneingeschränkte Eignung für alle Typen von Singularitäten zu nennen. Zu beachten ist, dass, selbst wenn die gewünschte Beseitigung der Singularität erreicht wurde, die verbleibende Integrandenfunktion nicht in jedem Fall stetig oder stetig differenzierbar sein muss. Da die Anwendbarkeit von Quadraturverfahren an bestimmte Voraussetzungen in Bezug auf die Differenzierbarkeit des Integranden gebunden ist, ist dessen präzise Analyse unerlässlich, da es sonst zum Versagen von Verfahren höherer Ordnung kommen kann. Aus diesem Grund wurde für die Extraktionstechnik in der elektromagnetischen Feldberechnung von TASKINEN [88] eine Erweiterung vorgeschlagen, die ausgehend von der TAYLOR<sup>22</sup>-Reihenentwicklung der Fundamentallösung bezüglich der Abstandsfunktion  $R = \|\vec{r} - \vec{r}'\|$

$$\frac{\exp(-jk_0 R)}{R} = \left( \frac{1}{R} - \frac{k_0^2}{2} R + \frac{k_0^4}{24} R^3 \mp \dots \right) - j \left( k_0 - \frac{k_0^3}{6} R^2 + \frac{k_0^5}{120} R^4 \mp \dots \right) \quad (2.4.9)$$

die Extraktion einer den Erfordernissen angepassten Anzahl von Termen erlaubt. Nach genauer Untersuchung der Ableitungen der Abstandsfunktion

$$\partial_\eta^\mu \partial_\xi^\nu R^n = \mathcal{O}(R^{n-\mu-\nu}), \quad \text{für } R \rightarrow 0, n \text{ ungerade} \quad (2.4.10a)$$

$$\partial_\eta^\mu \partial_\xi^\nu R^n = \begin{cases} 0 & ; \mu + \nu > n \\ \mathcal{O}(R^{n-\mu-\nu}) & ; \mu + \nu \leq n \end{cases}, \quad \text{für } R \rightarrow 0, n \text{ gerade} \quad (2.4.10b)$$

lässt Gleichung (2.4.9) einige wichtige Schlüsse zu. Alle geraden Potenzen dieser Funktion sind beliebig oft stetig differenzierbar, womit unter der Annahme hinreichend glatter Belegfunktionen der Anwendbarkeit der GAUSS-Quadratur auf den Imaginärteil der Matrixbeiträge nichts im Wege steht. Demgegenüber wachsen die Ableitungen des Realteils, der sich aus den ungeraden Potenzen von  $R$  zusammensetzt, ab einer bestimmten Ordnung unbeschränkt an. Daraus folgt, dass für Aufpunkte auf dem Rand oder innerhalb des Integrationsgebietes eine von der Wahl der eingesetzten Quadraturregel abhängige Mindestanzahl von Reihengliedern subtrahiert werden muss.

Die Aufspaltung der Integralbeiträge zum diskreten Operator  $\mathcal{T}$  aus Gleichung (2.3.26) in den regulären Anteil

$$\underline{Z}_{mn,\text{reg}}^{\pm\pm} = \frac{jk_0 Z_0}{4A_m^\pm A_n^\pm} \int \int_{T_m^\pm T_n^\pm} z_{mn}^{\pm\pm}(\vec{r}, \vec{r}') \left[ \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') - \sum_{i=0}^I \frac{(-1)^i k_0^{2i}}{4\pi(2i)!} \|\vec{r} - \vec{r}'\|^{2i-1} \right] dA(\vec{r}) dA(\vec{r}') \quad (2.4.11)$$

sowie den singulären Anteil

$$\underline{Z}_{mn,\text{sing}}^{\pm\pm} = \sum_{i=0}^I \frac{(-1)^i k_0^{2i}}{4\pi(2i)!} \frac{jk_0 Z_0}{4A_m^\pm A_n^\pm} \int \int_{T_m^\pm T_n^\pm} z_{mn}^{\pm\pm}(\vec{r}, \vec{r}') \|\vec{r} - \vec{r}'\|^{2i-1} dA(\vec{r}) dA(\vec{r}') \quad (2.4.12)$$

besitzt die Form:

$$\underline{Z}_{mn}^{\pm\pm} = \underline{Z}_{mn,\text{reg}}^{\pm\pm} + \underline{Z}_{mn,\text{sing}}^{\pm\pm}. \quad (2.4.13)$$

---

<sup>22</sup>Brook Taylor, 1685–1731, britischer Mathematiker

Hierin wurde für die reguläre Dichtefunktion abkürzend

$$z_{mn}^{\pm\pm}(\vec{r}, \vec{r}') := l_m^{\pm} l_n^{\pm} \left[ (\vec{r} - \vec{r}_m^{\pm}) \cdot (\vec{r}' - \vec{r}_n^{\pm}) - \frac{4}{k_0^2} \right] \quad (2.4.14)$$

gesetzt. Durch passende Wahl der Extraktionsordnung  $I$  ist für die Integrandenfunktion in Gleichung (2.4.11) eine beliebige Differenzierbarkeit erzielbar, so dass dieses Integral leicht mit Hilfe der Standard-GAUSS-Quadratur (2.4.7) approximativ gelöst werden kann. Das innere Integral über das erste Summenglied der abgespaltenen Singularität (2.4.12), das auch als Potential einer örtlich linear veränderlichen, statischen Ladungsverteilung interpretiert werden kann, besitzt nach WILTON [97] und GRAGLIA [40] die geschlossene Darstellung

$$\int_{T_n^{\pm}} \frac{\vec{r}' - \vec{r}_n^{\pm}}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|} dA(\vec{r}) = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} f_{3i} \vec{u}_i + (\vec{r}_x - \vec{r}_n^{\pm}) (P_i^0 f_{2i} - |d| \beta_i), \quad (2.4.15)$$

mit

$$f_{2i} := \ln \left| \frac{R_i^+ + s_i^+}{R_i^- + s_i^-} \right|, \quad f_{3i} := (s_i^+ R_i^+ - s_i^- R_i^-) + (R_i^0)^2 f_{2i},$$

$$\beta_i := \arctan \left[ \frac{P_i^0 s_i^+}{(R_i^0)^2 + |d| R_i^+} \right] - \arctan \left[ \frac{P_i^0 s_i^-}{(R_i^0)^2 + |d| R_i^-} \right]. \quad (2.4.16a)$$

Hierin bezeichnet  $P_x$  die Orthogonalprojektion des Aufpunktes  $P$  in die Ebene, in der das Dreieck  $T_n^{\pm}$  liegt,  $d$  ist die vorzeichenbehaftete Distanz zwischen diesen beiden Punkten,  $\vec{n}$  der Normalenvektor und  $\vec{t}_i$  der Tangentenvektor der Kante  $E_i$  des Dreiecks. Alle weiteren Geometriegrößen können Abbildung 2.6 entnommen werden. Ausgehend von diesem Ergebnis lässt sich nach YLÄ-OIJALA und TASKINEN [98] rekursiv der Wert des Integrals über alle anderen Potenzen der Abstandsfunktion gewinnen. Für die noch verbleibende äußere Integration konnte bisher nur im Fall identischer Dreiecke eine analytische Lösung, die im Anhang A.1 ausführlich hergeleitet wird, gefunden werden. Zwar ist das Resultat der inneren Integration für den schwach singulären Operator überall stetig, beim Durchgang durch das Integrationsgebiet jedoch nicht stetig differenzierbar. Dies hat die bereits diskutierten Probleme mit Quadraturformeln höherer Ordnung zur Folge. Bei den stark singulären Operatoren weist diese Funktion sogar auf dem Rand eine logarithmische Singularität auf, die ohnehin eine gesonderte Behandlung erfordert [98]. Zur Illustration dieser Überlegungen ist das Konvergenzverhalten der GAUSS-Quadratur für die anfangs genannten Fälle in Abbildung 2.7 grafisch dargestellt. Als Beispiel hierfür wurde das Integral

$$I_{i0} = \int_{T_i} \int_{T_0} \frac{\exp(-j \|\vec{r} - \vec{r}'\|)}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|} dA(\vec{r}) dA(\vec{r}'), \quad i \in [0, 3] \quad (2.4.17)$$

über zwei rechtwinklige Dreiecke, welche in einer Ebene liegen und deren Katheten die Länge Eins besitzen

$$T_0 = \{(x, y) : 0 \leq x \leq 1 \wedge 0 \leq y \leq 1 - x\},$$

$$T_1 = \{(x, y) : -1 \leq x \leq 0 \wedge -1 - x \leq y \leq 0\},$$



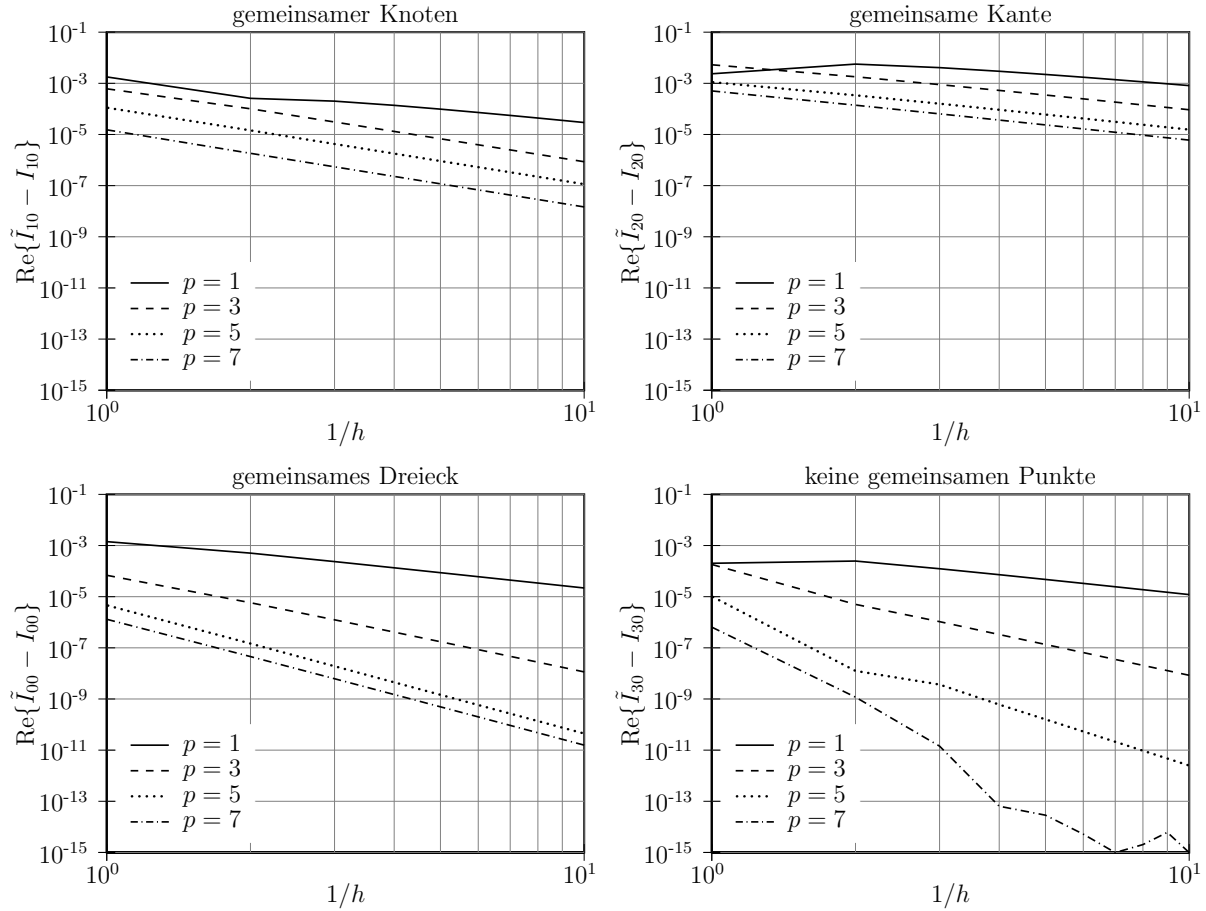


Abbildung 2.7: Konvergenzverhalten des Standard-Gauss-Quadraturverfahrens nach Regularisierung des Testintegrals mittels der Extraktionsmethode. Dargestellt ist der Realteil des Fehlers in Abhängigkeit von der reziproken Gitterschrittweite des verfeinerten Einheitsdreiecks bei Abspaltung der ersten beiden Reihenglieder.

sprung des lokalen Koordinatensystems des Dreiecks durch die JACOBI<sup>23</sup>-Determinante  $J_{\lambda_1, \lambda_2}(\xi, \eta) = \xi$  behoben wird:

$$\int_0^1 \int_0^{\lambda_2} \frac{f(\lambda_1, \lambda_2)}{\sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2}} d\lambda_1 d\lambda_2 = \int_0^1 \int_0^1 \frac{f(\xi, \xi\eta)}{\sqrt{1 + \eta^2}} d\eta d\xi. \quad (2.4.18)$$

Die Regularisierung der singulären Beiträge zu den hier betrachteten diskreten Integraloperatoren gestaltet sich nicht nur wegen des höherdimensionalen Integrationsgebietes schwieriger, sondern hauptsächlich weil die Singularität nicht isoliert ist. Abhilfe schafft die Einführung von Relativkoordinaten, wodurch die Singularität fixiert und damit die Anwendung der DUFFY-Transformation ermöglicht wird [77, 91]. Die Aufbereitung der Integrale zur numerischen Auswertung der singulären Beiträge umfasst eine Reihe von Koordinatentransformationen, die nachfolgend in Anlehnung an SAUTER und SCHWAB [77] kurz skizziert werden sollen. Beginnend mit der Transformation des Integrationsgebietes  $T_m^\pm$  mit den Eckpunkten  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3$  sowie des Gebietes  $T_n^\pm$  mit den Eckpunkten  $\vec{r}'_1, \vec{r}'_2,$

<sup>23</sup>Carl Gustav Jacob Jacobi, 1804–1851, deutscher Mathematiker



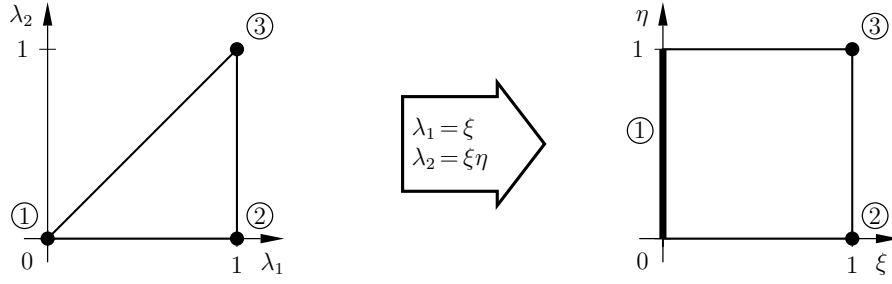


Abbildung 2.8: *Bilineare Koordinatentransformation nach Duffy. Durch den Übergang vom dreieckigen Integrationsgebiet auf das Einheitsquadrat wird eine im Ursprung des lokalen Koordinatensystems vorhandene schwache Punktsingularität eliminiert.*

$\vec{r}'_3$  auf das in Abbildung 2.8 gezeigte Referenzgebiet mittels

$$\vec{r}(\lambda_1, \lambda_2) = \vec{r}_1(1 - \lambda_1) + \vec{r}_2(\lambda_1 - \lambda_2) + \vec{r}_3\lambda_2, \quad 0 \leq \lambda_1 \leq 1, 0 \leq \lambda_2 \leq \lambda_1 \quad (2.4.19a)$$

$$\vec{r}'(\lambda'_1, \lambda'_2) = \vec{r}'_1(1 - \lambda'_1) + \vec{r}'_2(\lambda'_1 - \lambda'_2) + \vec{r}'_3\lambda'_2, \quad 0 \leq \lambda'_1 \leq 1, 0 \leq \lambda'_2 \leq \lambda'_1 \quad (2.4.19b)$$

nimmt die Belegfunktion in den eingeführten lokalen Koordinaten die Gestalt

$$\hat{z}_{mn}^{\pm\pm}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda'_1, \lambda'_2) := z_{mn}^{\pm\pm}[\vec{r}(\lambda_1, \lambda_2), \vec{r}'(\lambda'_1, \lambda'_2)] \quad (2.4.20)$$

an. Im weiteren Verlauf muss zwischen den eingangs erwähnten Fällen unterschieden werden.

### Dreiecke mit gemeinsamem Punkt

Unter Berücksichtigung, dass beide Dreiecke den gemeinsamen Punkt  $\vec{r}_1 = \vec{r}'_1$  besitzen, ermöglicht die geeignete Einführung der Relativkoordinaten  $u_1, u_2, u_3$  und  $u_4$  die Fixierung der Singularität im Ursprung dieses Koordinatensystems. Zur Elimination der

$i$	1	2
$u_{1i}$	$\xi$	$\xi\eta_2$
$u_{2i}$	$\xi\eta_1$	$\xi\eta_2\eta_3$
$u_{3i}$	$\xi\eta_2$	$\xi$
$u_{4i}$	$\xi\eta_2\eta_3$	$\xi\eta_1$
$J_i$	$\xi^3\eta_2$	$\xi^3\eta_2$

Tabelle 2.2: *Multilineare Koordinatentransformation zur Behebung der Punktsingularität im Fall eines gemeinsamen Punktes [77].*

Punktsingularität muss sie sich in einem Eckpunkt befinden, was durch eine Zerlegung des vierdimensionalen Polyeders in zwei Teilgebiete erreicht werden kann. In Tabelle 2.2 sind die passenden DUFFY-Transformationen für jedes Teilgebiet angegeben. Mit der Fundamentallösung in Relativkoordinaten

$$\hat{\underline{G}}(u_{1i}, u_{2i}, u_{3i}, u_{4i}) := \underline{G}[\vec{r}(u_{1i}, u_{2i}), \vec{r}'(u_{3i}, u_{4i})] \quad (2.4.21)$$

folgt für das regularisierte Integral:

$$\underline{Z}_{mn}^{\pm\pm} = jk_0 Z_0 \sum_{i=1}^2 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \hat{z}_{mn}^{\pm\pm}(u_{1i}, u_{2i}, u_{3i}, u_{4i}) \hat{\underline{G}}(u_{1i}, u_{2i}, u_{3i}, u_{4i}) J_i d\xi d\eta_1 d\eta_2 d\eta_3. \quad (2.4.22)$$

### Dreiecke mit gemeinsamer Kante

Betrachtet werden zwei Dreiecke mit der gemeinsamen Kante zwischen den Punkten  $\vec{r}_1 = \vec{r}'_1$  und  $\vec{r}_2 = \vec{r}'_2$ . In diesem Fall legt die Einführung der Relativkoordinaten  $u_1$ ,  $u_2$  und  $u_3$  die Singularität im Ursprung dieses Koordinatensystems fest. Nach passen-

$i$	1	2	3	4	5
$\lambda_{1i}$	$\xi$	$\xi$	$\xi(1 - \eta_1\eta_2)$	$\xi(1 - \eta_1\eta_2\eta_3)$	$\xi(1 - \eta_1\eta_2\eta_3)$
$u_{1i}$	$-\xi\eta_1\eta_2$	$-\xi\eta_1\eta_2\eta_3$	$\xi\eta_1\eta_2$	$\xi\eta_1\eta_2\eta_3$	$\xi\eta_1\eta_2\eta_3$
$u_{2i}$	$\xi\eta_1(1 - \eta_2)$	$\xi\eta_1\eta_2(1 - \eta_3)$	$\xi\eta_1\eta_2\eta_3$	$\xi\eta_1$	$\xi\eta_1\eta_2$
$u_{3i}$	$\xi\eta_1\eta_3$	$\xi\eta_1$	$\xi\eta_1(1 - \eta_2)$	$\xi\eta_1\eta_2(1 - \eta_3)$	$\xi\eta_1(1 - \eta_2\eta_3)$
$J_i$	$\xi^3\eta_1^2$	$\xi^3\eta_1^2\eta_2$	$\xi^3\eta_1^2\eta_2$	$\xi^3\eta_1^2\eta_2$	$\xi^3\eta_1^2\eta_2$

Tabelle 2.3: Multilineare Koordinatentransformation zur Behebung der Punktsingularität im Fall einer gemeinsamen Kante [77].

der Zerlegung des Integrationsgebietes in fünf vierdimensionale Polyeder folgt mit der Fundamentallösung

$$\hat{G}(u_{1i}, u_{2i}, u_{3i}) := \underline{G}[\vec{r}(\lambda_{1i}, u_{3i}), \vec{r}'(u_{1i} + \lambda_{1i}, u_{2i})] \quad (2.4.23)$$

und den in Tabelle 2.3 angegebenen Variablensubstitutionen für das regularisierte Integral:

$$\underline{Z}_{mn}^{\pm\pm} = jk_0 Z_0 \sum_{i=1}^5 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \hat{z}_{mn}^{\pm\pm}(\lambda_{1i}, u_{3i}, u_{1i} + \lambda_{1i}, u_{2i}) \hat{G}(u_{1i}, u_{2i}, u_{3i}) J_i d\xi d\eta_1 d\eta_2 d\eta_3. \quad (2.4.24)$$

### Identische Dreiecke

In diesem Fall sind beide Dreiecke identisch und besitzen die gemeinsamen Eckpunkte  $\vec{r}_1 = \vec{r}'_1$ ,  $\vec{r}_2 = \vec{r}'_2$  und  $\vec{r}_3 = \vec{r}'_3$ . Durch Einführung der Relativkoordinaten  $u_1$  und  $u_2$  wird die Singularität im Ursprung fixiert und die Fundamentallösung erhält die Form:

$$\hat{G}(u_{1i}, u_{2i}) := \underline{G}[\vec{r}(\lambda_{1i}, \lambda_{2i}), \vec{r}'(u_{1i} + \lambda_{1i}, u_{2i} + \lambda_{2i})]. \quad (2.4.25)$$

Durch eine weitere Koordinatentransformation kann das aus sechs Polyedern bestehende

$i$	1	2	3
$\lambda_{1i}$	$\xi$	$\xi$	$\xi(1 - \eta_1\eta_2\eta_3)$
$\lambda_{2i}$	$\xi\eta_1(1 - \eta_2 + \eta_2\eta_3)$	$\xi(1 - \eta_1 + \eta_1\eta_2)$	$\xi\eta_1(1 - \eta_2\eta_3)$
$u_{1i}$	$\xi\eta_1\eta_2$	$\xi\eta_1\eta_2\eta_3$	$-\xi\eta_1\eta_2\eta_3$
$u_{2i}$	$\xi\eta_1\eta_2\eta_3$	$\xi\eta_1\eta_2$	$\xi\eta_1\eta_2(1 - \eta_3)$
$J_i$	$\xi^3\eta_1^2\eta_2$	$\xi^3\eta_1^2\eta_2$	$\xi^3\eta_1^2\eta_2$

Tabelle 2.4: Multilineare Koordinatentransformation zur Behebung der Punktsingularität im Fall identischer Dreiecke [77].

Integrationsgebiet um die Hälfte reduziert werden, womit sich unter Berücksichtigung der Symmetrie der Fundamentallösung  $\hat{G}(-u_{1i}, -u_{2i}) = \hat{G}(u_{1i}, u_{2i})$  und nach Einsetzen

der in Tabelle 2.4 angegebenen Transformationsbeziehungen das regularisierte Integral schließlich in der Form

$$\begin{aligned} \underline{Z}_{mn}^{\pm\pm} = & jk_0 Z_0 \sum_{i=1}^3 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 [\hat{z}_{mn}^{\pm\pm}(\lambda_{1i}, \lambda_{2i}, \lambda_{1i} - u_{1i}, \lambda_{2i} - u_{2i}) \dots \\ & + \hat{z}_{mn}^{\pm\pm}(\lambda_{1i} - u_{1i}, \lambda_{2i} - u_{2i}, \lambda_{1i}, \lambda_{2i})] \hat{G}(u_{1i}, u_{2i}) J_i d\xi d\eta_1 d\eta_2 d\eta_3 \end{aligned} \quad (2.4.26)$$

präsentiert.

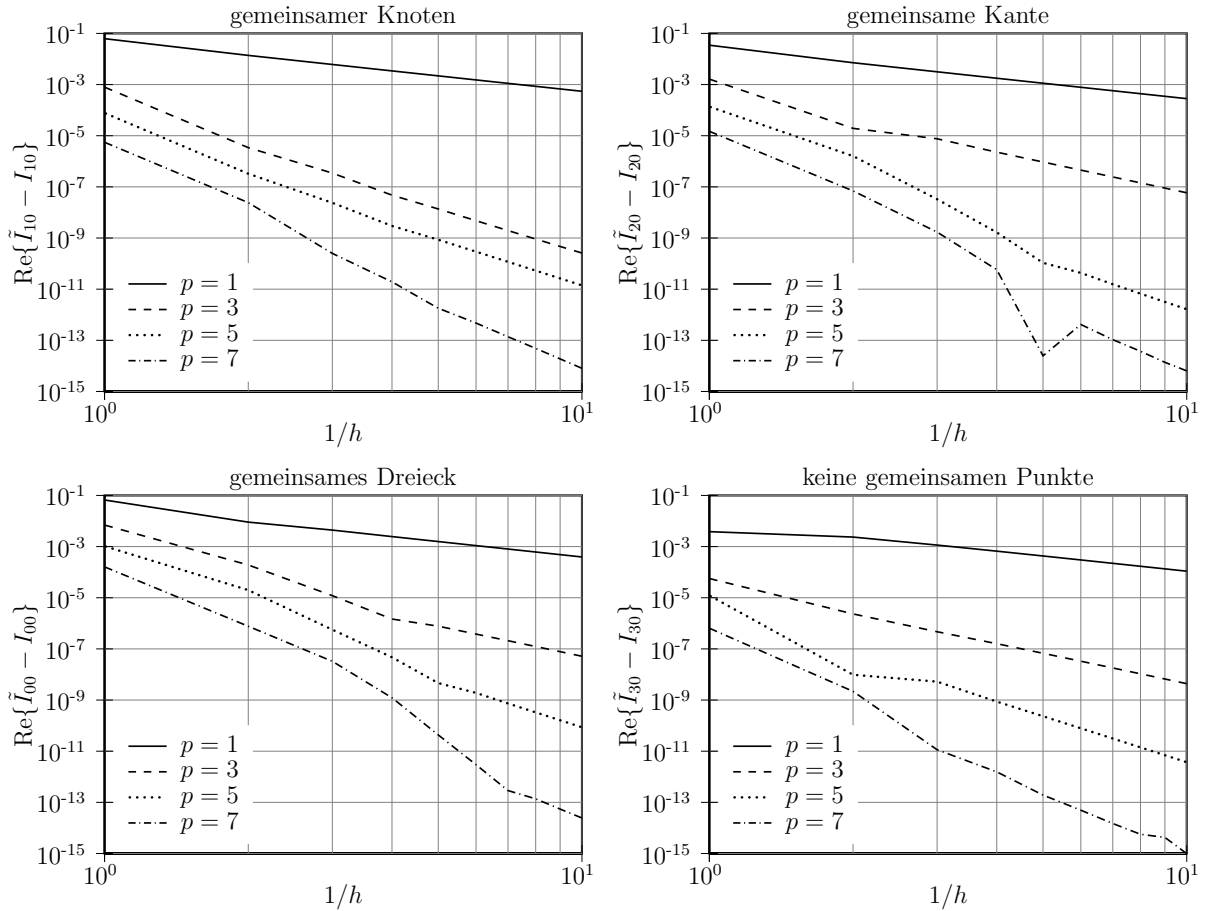


Abbildung 2.9: Konvergenzverhalten der gewöhnlichen Gauss-Quadratur nach Regularisierung des Integrals mittels der Duffy-Transformation. Dargestellt ist der Fehler des Realteils in Abhängigkeit von der reziproken Schrittweite des verfeinerten Einheitsdreiecks.

Als Ergebnis erhält man in allen Fällen mehrere Integrale mit glatter Integrandenfunktion über den vierdimensionalen Hyperwürfel, für deren Auswertung die Tensor-GAUSS-Quadratur (2.4.4) prädestiniert ist. Anzumerken ist, dass die beschriebene Vorgehensweise nicht nur für schwach singuläre Integrale sondern bedingt auch für stark singuläre Integrale, wie sie beispielsweise bei der Berechnung des im Operator  $\mathcal{M}$  auftretenden CAUCHYSchen Hauptwertes auftreten, geeignet ist [77].

Wie im Anhang A.2 dargelegt ist, können die regularisierten Integrale teilweise analytisch gelöst werden, so dass letztendlich das Integrationsgebiet für den Fall identischer Dreiecke auf das Einheitsintervall, für den Fall einer gemeinsamen Kante auf das Einheitsquadrat

und für den Fall eines gemeinsamen Knotens auf den Einheitswürfel reduziert werden kann [91], wodurch der Rechenaufwand zur Ausführung der numerischen Integration drastisch herabgesetzt wird.

In Abbildung 2.9 ist das Konvergenzverhalten der Tensor-GAUSS-Quadratur für das in Abschnitt 2.4.2.1 ausgewählte Beispiel bei Anwendung der regularisierenden Koordinatentransformation grafisch dargestellt, wobei für den Integranden die im Anhang A.2 abgeleiteten Ausdrücke verwendet wurden. In allen untersuchten Fällen wird die erwartete asymptotische Konvergenzordnung des Quadraturfehlers erreicht. Eingehende theoretische Untersuchungen zum Einfluss des Quadraturfehlers auf das Diskretisierungsverfahren für elliptische Integralgleichungen und die daraus folgenden Konsequenzen können beispielsweise [77] entnommen werden.

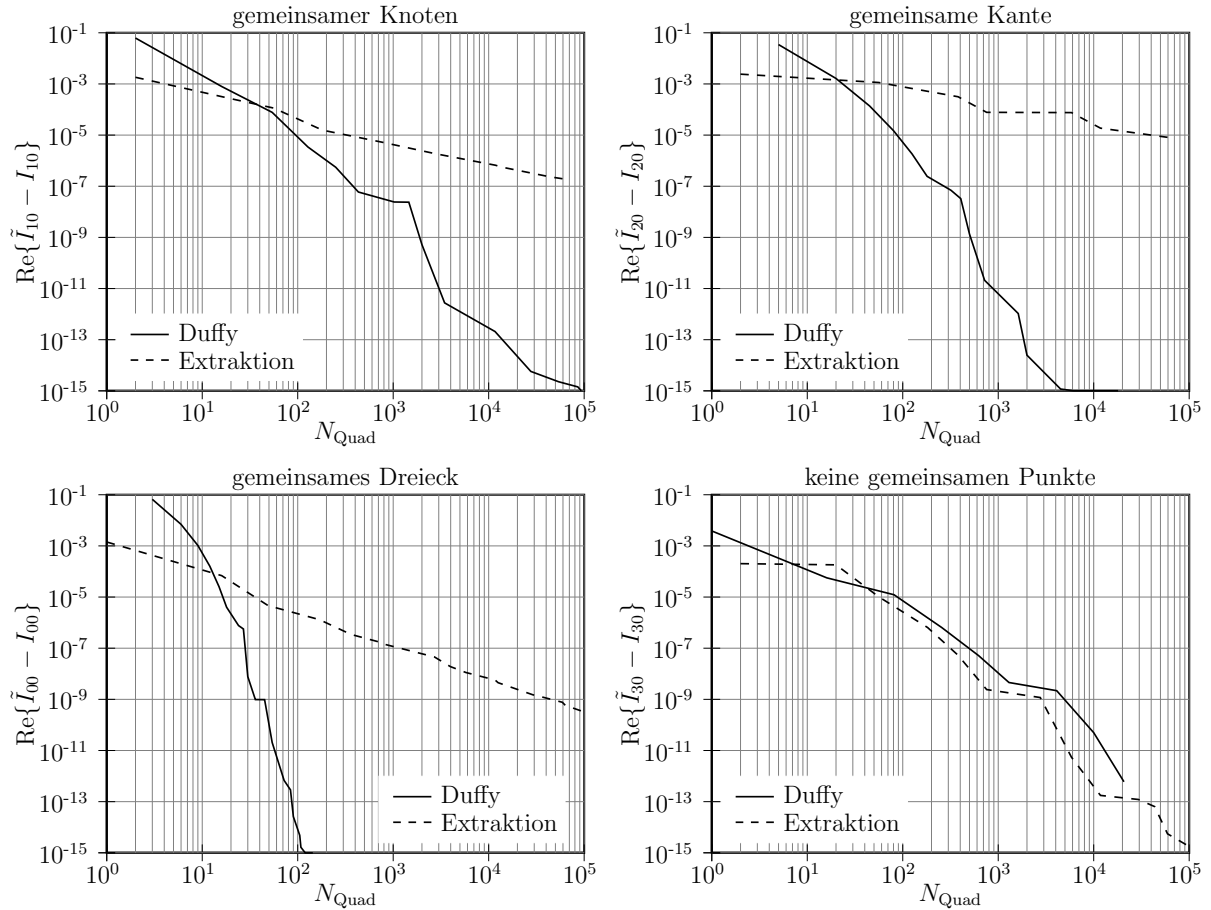


Abbildung 2.10: Vergleich der Effizienz beider Regularisierungstechniken. Gezeigt ist der durch eine  $hp$ -Verfeinerung minimal erreichbare Fehler des Realteils in Abhängigkeit von der Gesamtzahl der Quadraturpunkte.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass jede der beiden vorgestellten Methoden ihren bevorzugten Anwendungsbereich besitzt. Für den Fall, dass eine vollständige analytische Lösung des abgespaltenen singulären Integrals zur Verfügung steht, ist die Methode der Singularitätssubtraktion aufgrund der einfachen rechentechnischen Umsetzung sowie hohen Effizienz anderen Regularisierungstechniken bei gleicher Dimension des Integrals überlegen. Beim GALERKIN-Verfahren wird der wirksame Einsatz von Quadraturverfahren

höherer Ordnung jedoch durch die unvermeidbare numerische Auswertung von Integralen mit unzureichend glattem Integranden verhindert. Die Aufbereitung der Integrale für die regularisierende Koordinatentransformation führt auf mehrere Teilintegrale mit kompliziert aufgebauten Integranden, was mit einem hohen numerischen Aufwand verbunden ist. Demgegenüber steht jedoch der gesicherte Erhalt der Quadraturordnung sowie eine mathematisch fundierte Analyse des Zusammenhangs zwischen Quadraturordnung und Konvergenzeigenschaften des GALERKIN-Verfahrens [77].

Ein Vergleich der Effizienzen beider Verfahren anhand des Beispielproblems aus dem vorherigen Abschnitt zeigt, dass die Extraktionstechnik bereits mit wenigen Quadraturpunkten sehr genaue Ergebnisse liefert, die regularisierende Koordinatentransformation jedoch wegen der höheren Konvergenzrate sowie der niedrigeren Dimension des Integrals für höhere Genauigkeitsanforderungen besser geeignet und leistungsfähiger ist. Aufgetragen ist in Abbildung 2.10 der durch eine optimale Wahl der Quadraturordnung und einer gleichmäßigen Verfeinerung des Integrationsgebietes erreichbare kleinstmögliche Fehler im Realteil des Integrals in Abhängigkeit von der Gesamtzahl der Quadraturpunkte, welche als Maß für die Kosten zur Auswertung des Integranden angenommen werden kann. Angemerkt sei, dass durch eine adaptive Verfeinerung des Integrationsgebietes eine weitere Verbesserung erzielt werden kann, dies soll hier jedoch nicht näher betrachtet werden. Im Fall, dass die Dreiecke keine gemeinsamen Punkte besitzen, ist die Dimension der Integrale gleich und beide Verfahren konvergieren mit der höchstmöglichen Ordnung, was sich in den nahezu identischen Fehlerverläufen widerspiegelt.

## 2.5 Aspekte bei der Lösung des diskreten Problems

### 2.5.1 Elektromagnetische Streuprobleme

Die Diskretisierung der zur Beschreibung eines elektromagnetischen Streuproblems dienenden Randintegralgleichung führt gewöhnlich auf ein lineares Gleichungssystem, für dessen Behandlung die numerische Mathematik eine Vielzahl von Lösungsverfahren bereit hält. Die Auswahl eines geeigneten und vor allem effizienten Verfahrens hängt vorrangig von den Eigenschaften der Systemmatrix ab, aber auch andere Gesichtspunkte wie die Größe des diskreten Problems und die Anzahl der Anregungen, die bei Streuproblemen durchaus sehr große Werte annehmen kann, sind dabei zu berücksichtigen.

Die diskreten Gegenstücke der Integraloperatoren sind im Allgemeinen dicht besetzt, wodurch der Speicheraufwand quadratisch mit der Zahl der Freiheitsgrade anwächst und die asymptotische Komplexität des eingesetzten Lösungsalgorithmus mindestens von zweiter Ordnung ist. Iterative Lösungsalgorithmen und Projektionsverfahren bieten daher ohne zusätzliche Maßnahmen gegenüber direkten Verfahren keinen nennenswerten Vorteil. Erst mit der Entwicklung von Matrixkompressionsverfahren, wie die physikalisch motivierte Schnelle-Multipol-Methode (*Multilevel Fast Multipole Method*) [42], der auf algebraischer Ebene angesetzte Panel-Clustering-Algorithmus [44] oder die Approximation dicht besetzter Matrizen durch hierarchisch geordnete Niedrigrangmatrizen ( $\mathcal{H}$ -Matrizen) [43], konnte dieser entscheidende Nachteil ausgeglichen werden, womit die den sonst dünn besetzten

Systemen vorbehaltenen KRYLOW<sup>24</sup>-Unterraumverfahren auch in der Randelementmethode effizient einsetzbar sind und damit auch elektrisch große Probleme bewältigt werden können.

Für im Verhältnis zur Wellenlänge kleine bis mittlere Problemgrößen sind häufig direkte Verfahren trotz ihrer kubischen Komplexitätsordnung den iterativen Strategien in der Randelementmethode überlegen. Grund hierfür ist zum einen, dass die genannten Beschleunigungsverfahren selbst einen sehr komplexen Aufbau besitzen und damit hohe Anforderungen an die numerische Umsetzung stellen. Zum anderen weisen die diskreten Randintegraloperatoren schlechte Konditioneigenschaften auf, was zu einer leistungsfähigen Vorkonditionierung des zu lösenden Gleichungssystems zwingt, die mit einem entsprechenden Zusatzaufwand verbunden ist. Schlecht konditionierte Matrizen sind dagegen für direkt arbeitende Verfahren, die auch einfach zu implementieren sind, vollkommen unproblematisch. Insbesondere bei multipler Anregung tritt deren Vorzug deutlich hervor. So ist bei Verwendung eines Projektionsverfahrens das Gleichungssystem für jede Anregung wiederholt zu lösen, wodurch sich der Aufwand abhängig von der Anzahl der Anregungen vervielfacht. Demgegenüber kann der damit verbundene numerische Mehraufwand bei Einsatz direkter Verfahren vernachlässigt werden, da die rechenzeitintensive Inversion oder LU-Zerlegung der Systemmatrix nur ein einziges Mal durchzuführen ist. Damit sind direkte Lösungsverfahren auch weiterhin von praktischer Relevanz.

## 2.5.2 Eigenwertprobleme

Aufgrund der nichtlinearen Abhängigkeit des Integralkerns von der Wellenzahl resultiert aus der diskreten Approximation des Integraloperators ein indirektes Eigenwertproblem, dessen Behandlung sich im Gegensatz zur Lösung linearer Eigenwertprobleme ungleich schwieriger gestaltet und derzeit immer noch Gegenstand intensiver Forschung ist. In [66, 57, 14] werden die wichtigsten Lösungskonzepte vorgestellt und eingehend analysiert.

Eine Möglichkeit zur Konstruktion von iterativen Lösungsverfahren besteht in einer äquivalenten Formulierung der Eigenwertaufgabe als Optimierungsproblem [53]. Die Bestimmung von Eigenwerten ist gleichbedeutend mit dem Aufsuchen derjenigen Parameter, für die die davon abhängige lineare Abbildung einen nichttrivialen Kern besitzt und damit singulär wird. Da sich der kleinste Singulärwert einer quadratischen Matrix als Abstand zur nächsten singulären Matrix deuten lässt, bietet dieser sich als mögliche Zielfunktion an, welche an den gesuchten Punkten ein Minimum mit verschwindendem Wert annimmt. Im Allgemeinen werden die Eigenwerte aus dem Bereich der komplexen Zahlen angenommen, so dass ein nichtlineares Minimierungsproblem für eine reellwertige Funktion in zwei Variablen vorliegt. Um die Bestimmung der Ableitung des Integraloperators zu umgehen, wurde sich in dieser Arbeit unter anderem für ein von POWELL [71] vorgeschlagenes ableitungsfreies Verfahren entschieden. Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass bedingt durch eine begrenzte Genauigkeit der Zahlendarstellung auf einer Rechenanlage und durch numerische Fehler die gesuchten Minima etwas vom theoretischen Wert abweichen, worauf bei einer Implementierung zu achten ist.

Neben diesen heuristischen Ansätzen existieren noch weitere iterative Strategien, deren

---

<sup>24</sup>Alexei Nikolajewitsch Krylow, 1863–1945, russischer Schiffsbauingenieur und Mathematiker

Ausgangspunkt üblicherweise eine auf klassischen Methoden zur Lösung nichtlinearer Gleichungen basierende Linearisierung des indirekten Eigenwertproblems bildet. Ein Vertreter dieser Klasse ist das Regula-falsi-Verfahren, das ebenfalls im Rahmen dieser Arbeit eingesetzt wurde. Dieser Algorithmus baut auf einer linearen Interpolation des Integraloperators zwischen zwei vorgegebenen Frequenzpunkten auf, womit das Problem auf eine Sequenz von linearen Eigenwertproblemen zurückgeführt ist. Vorteil dieses Algorithmus ist einerseits die sehr einfache numerische Umsetzbarkeit und zum anderen die Vermeidung der Differentiation des diskreten Operators. Entscheidende Nachteile dieses Schemas sind jedoch die unumgängliche Ausführung einer numerisch aufwändigen LU-Zerlegung der Systemmatrix und die Auswertung eines linearen Eigenwertproblems in jedem Iterationsschritt. Derartige Strategien sind deshalb nur für kleine Systemgrößen geeignet. Da zudem eine eventuell vorhandene dünne Besetzungsstruktur der Matrix nicht erhalten bleibt, beschränkt sich deren Hauptanwendungsgebiet letztendlich auf Systeme mit dicht besetzten Matrizen. Zu erwähnen ist, dass die genannten iterativen Verfahren lediglich einen einzelnen Eigenwert liefern, für den bereits im Vorfeld ein hinreichend genauer Schätzwert vorliegen muss.

Einer mathematisch fundierten Entwicklung von Projektionsverfahren zur schnellen und genauen Lösung indirekter Eigenwertprobleme mit großen, dünn besetzten Matrizen wurde erst in jüngster Zeit die nötige Aufmerksamkeit geschenkt. Wie bei echten Iterationsverfahren beruhen auch sie auf einer Erweiterung von bekannten Lösungsmethoden für lineare Eigenwertprobleme, wie zum Beispiel das ARNOLDI-Verfahren oder der JACOBI-DAVIDSON-Algorithmus. In Analogie zur Lösung linearer Gleichungssysteme sind auch für den hier betrachteten Problemtyp die bereits erwähnten Techniken zur Beschleunigung der Matrix-Vektor-Multiplikationen uneingeschränkt anwendbar, so dass ein Einsatz dieser Projektionsverfahren zur Lösung von Eigenwertaufgaben, die aus der Anwendung der Randelementmethode hervorgehen, denkbar wäre.

## 2.6 Bestimmung von Streuquerschnitten

### 2.6.1 Begriffsbildung und Definition

Streuquerschnitte dienen der Charakterisierung von Streuobjekten und besitzen eine zentrale Bedeutung in der Radartechnik<sup>25</sup>. In der Radargleichung wird dieser Parameter als Verhältnis der pro Raumwinkelement vom Ziel zum Empfänger gestreuten Leistung zu der auf das Zielobjekt einfallenden Flächenleistungsdichte unter Fernfeldbedingungen definiert [33]. Somit entspricht der Radarquerschnitt eines Streuers dem Oberflächeninhalt eines als fiktiv zu betrachtenden äquivalenten Objektes, das die auf seine Oberfläche einfallende Leistung vollständig und isotrop reflektiert. Folglich lässt sich der Streuquerschnitt, der im optischen Bereich stets kleiner als der Oberflächeninhalt des Streuers ist, als effektive Wirkfläche des Radarziels, die das Signal unterbricht und isotrop zurückstreut, interpretieren. Beispielsweise ist für hinreichend kleine Wellenlängen der Streuquerschnitt einer sehr gut leitfähigen Kugel gleich dem projizierten Flächeninhalt.

---

<sup>25</sup>Das Akronym RADAR steht für „Radio Detection And Ranging“.

Unter Verwendung des POYNTINGSchen<sup>26</sup> Vektors der einfallenden Welle  $\underline{\vec{S}}^{\text{inc}}$  und des gestreuten Feldes  $\underline{\vec{S}}^{\text{sc}}$  lässt sich für den skalaren Radarstreuquerschnitt eine mathematische Definition

$$\sigma := \lim_{r \rightarrow \infty} 4\pi r^2 \frac{\text{Re} \left\{ \vec{e}_r \cdot \underline{\vec{S}}^{\text{sc}} \right\}}{\text{Re} \left\{ \vec{n}_i \cdot \underline{\vec{S}}^{\text{inc}} \right\}}, \quad \text{mit: } \vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{r} \quad (2.6.1)$$

auf Basis von zeitlich gemittelten Leistungsflussdichten auf der Fernkugeloberfläche angeben. Unterscheidet sich die Richtung der einfallenden Welle von der des Beobachtungspunktes, wird vom bistatischen Radarquerschnitt gesprochen, welcher für Radaranlagen mit örtlich getrennter Sende- und Empfangseinheit von Interesse ist. Stimmt die Richtung der Anregung genau mit der des Beobachtungspunktes überein, liegt der monostatische Fall vor, der für Anlagen mit kombinierter Sende- und Empfangseinheit bedeutsam ist.

## 2.6.2 Fernfeldberechnung

Zur Bestimmung des durch die induzierten Oberflächenströme erregten Fernfeldes erweist sich die für stetige elektromagnetische Felder gültige Reihenentwicklung in Kugelkoordinaten

$$\underline{\vec{E}}^{\text{sc}}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{\exp(-jk_0 r)}{4\pi r} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\underline{\vec{e}}_m(\vartheta, \varphi)}{r^m}, \quad (2.6.2a)$$

$$\underline{\vec{H}}^{\text{sc}}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{\exp(-jk_0 r)}{4\pi r} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\underline{\vec{h}}_m(\vartheta, \varphi)}{r^m} \quad (2.6.2b)$$

als nützlich, wobei die Erfüllung der SILVER-MÜLLER-Abstrahlungsbedingung vorausgesetzt ist [27]. Für die durch die Fernkugeloberfläche tretende Gesamtleistung liefert ausschließlich das jeweils erste Glied dieser Entwicklung, dessen Koeffizient  $\underline{\vec{E}}_{\infty} := \underline{\vec{e}}_0$  bzw.  $\underline{\vec{H}}_{\infty} := \underline{\vec{h}}_0$  auch als *Fernfeldcharakteristik* bezeichnet wird, einen Beitrag. Bei Kenntnis der elektrischen Oberflächenstromdichte lassen sich diese Größen aus den integralen Darstellungsformeln durch Untersuchung des asymptotischen Verhaltens in weit entfernten Beobachtungspunkten gewinnen. Für die Fernfeldcharakteristiken der elektrischen und magnetischen Feldstärke ergeben sich nach Einführung des Fernfeldoperators

$$(\mathcal{F} \underline{\vec{K}})(\vartheta, \varphi) := jk_0 Z_0 \vec{e}_r(\vartheta, \varphi) \times \int_S \underline{\vec{K}}(\vec{r}') \exp[jk_0 \vec{e}_r(\vartheta, \varphi) \cdot \vec{r}'] dA(\vec{r}') \quad (2.6.3)$$

und unter Verwendung der einfach ableitbaren Beziehungen

$$\underline{\vec{H}}_{\infty} = Y_0 \vec{e}_r \times \underline{\vec{E}}_{\infty} \quad \Leftrightarrow \quad \underline{\vec{E}}_{\infty} = -Z_0 \vec{e}_r \times \underline{\vec{H}}_{\infty} \quad (2.6.4)$$

Ausdrücke der Form:

$$\underline{\vec{E}}_{\infty}(\vartheta, \varphi) = (\vec{e}_r \times \mathcal{F} \underline{\vec{K}})(\vartheta, \varphi), \quad (2.6.5a)$$

$$\underline{\vec{H}}_{\infty}(\vartheta, \varphi) = -Y_0 (\mathcal{F} \underline{\vec{K}})(\vartheta, \varphi). \quad (2.6.5b)$$

<sup>26</sup>John Henry Poynting, 1852–1914, englischer Physiker



Die Fernfeldanteile elektromagnetischer Wellen, die von beliebigen Stromverteilungen im freien Raum angeregt werden, propagieren somit in radiale Richtung

$$\vec{e}_r(\vartheta, \varphi) = \vec{e}_x \sin(\vartheta) \cos(\varphi) + \vec{e}_y \sin(\vartheta) \sin(\varphi) + \vec{e}_z \cos(\vartheta) \quad (2.6.6)$$

und besitzen nur Komponenten in der zugehörigen Transversalebene. Aus diesem Grund ist es üblich, zur Beschreibung der Fernfeldcharakteristiken sphärische Koordinaten zulegen. Mit der Leistungsflussdichte der als elliptisch polarisiert angenommenen ebenen Welle gemäß Gleichung (2.2.31) und der Darstellung der elektrischen Feldstärke in Komponenten des Kugelkoordinatensystems

$$\vec{E}_\infty = \vec{e}_\vartheta \underline{E}_{\infty,\vartheta} + \vec{e}_\varphi \underline{E}_{\infty,\varphi} \quad (2.6.7)$$

ist der Radarquerschnitt als primäre Zielgröße

$$\sigma(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4\pi} \frac{|\underline{E}_{\infty,\vartheta}(\vartheta, \varphi)|^2 + |\underline{E}_{\infty,\varphi}(\vartheta, \varphi)|^2}{|\underline{E}_0|^2 (1 + v^2)} \quad (2.6.8)$$

aus der Fernfeldcharakteristik des elektromagnetischen Streuproblems berechenbar.

Zwecks Ableitung der diskreten Gegenstücke zu den Gleichungen (2.6.5), die zur approximativen Berechnung der Fernfelddaten aus dem numerisch ermittelten Koeffizientenvektor  $\mathbf{i}$  erforderlich sind, werden die Funktionswerte der polaren und azimuthalen elektrischen Feldstärkekomponenten in  $M$  ausgewählten Beobachtungspunkten  $(\vartheta_m, \varphi_m)$  auf der Einheitskugeloberfläche als Elemente von Spaltenvektoren  $\underline{\mathbf{e}}_{\infty,\vartheta}$  und  $\underline{\mathbf{e}}_{\infty,\varphi}$  angesehen, die zu einem Blockvektor

$$\underline{\mathbf{e}}_\infty = \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{e}}_{\infty,\vartheta} \\ \underline{\mathbf{e}}_{\infty,\varphi} \end{pmatrix}, \quad \text{mit: } [\underline{\mathbf{e}}_{\infty,\vartheta}]_m = \underline{E}_{\infty,\vartheta}(\vartheta_m, \varphi_m), \quad [\underline{\mathbf{e}}_{\infty,\varphi}]_m = \underline{E}_{\infty,\varphi}(\vartheta_m, \varphi_m) \quad (2.6.9)$$

zusammengefasst werden. In gleicher Weise werden die Abtastwerte des magnetischen Fernfeldes einem Vektor  $\underline{\mathbf{h}}_\infty$  zugeordnet. Die Abbildung des Koeffizientenvektors der elektrischen Flächenstromdichte auf den der abgetasteten Fernfelddaten erfolgt durch den diskreten Fernfeldoperator

$$\underline{\mathbf{F}} = \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{F}}_\vartheta \\ \underline{\mathbf{F}}_\varphi \end{pmatrix}, \quad \text{mit: } [\underline{\mathbf{F}}_\vartheta]_{mn} = (\vec{e}_\vartheta \cdot \mathcal{F} \vec{f}_n)(\vartheta_m, \varphi_m), \quad [\underline{\mathbf{F}}_\varphi]_{mn} = (\vec{e}_\varphi \cdot \mathcal{F} \vec{f}_n)(\vartheta_m, \varphi_m), \quad (2.6.10)$$

der sich aus den beiden  $M \times N$ -Submatrizen  $\underline{\mathbf{F}}_\vartheta$  und  $\underline{\mathbf{F}}_\varphi$  zusammensetzt. Durch Einführung der Matrix

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \text{mit: } \mathbf{C}^2 = -\mathbf{I}, \quad (2.6.11)$$

die als diskretes Pendant zum kontinuierlichen Operator  $\vec{e}_r \times$  interpretiert werden kann, lässt sich in vollkommener Analogie zu Gleichung (2.6.4) der Zusammenhang zwischen den magnetischen und elektrischen Fernfeldvektoren

$$\underline{\mathbf{h}}_\infty = Y_0 \mathbf{C} \underline{\mathbf{e}}_\infty \Leftrightarrow \underline{\mathbf{e}}_\infty = -Z_0 \mathbf{C} \underline{\mathbf{h}}_\infty \quad (2.6.12)$$

herstellen, womit schließlich die gewünschte konsistente Übertragung der kontinuierlichen Beziehungen in eine diskrete Form

$$\underline{\mathbf{e}}_\infty = \mathbf{C} \underline{\mathbf{F}} \mathbf{i} \quad (2.6.13a)$$

$$\underline{\mathbf{h}}_\infty = -Y_0 \underline{\mathbf{F}} \mathbf{i} \quad (2.6.13b)$$

gelungen ist.

### 2.6.3 Schnelle Frequenzganganalyse

In der Praxis ist häufig der Streuquerschnitt nicht an einem einzelnen festen Frequenzpunkt, sondern innerhalb eines bestimmten Frequenzintervalls von Interesse. Eine weit verbreitete Vorgehensweise zur Bestimmung von Frequenzgängen besteht in der Verwendung von Zeitbereichsformulierungen mit entsprechend breitbandiger Anregung und einer anschließenden FOURIER-Transformation. Alternativ ist es auch möglich, die Frequenzganganalyse direkt im Frequenzbereich durchzuführen, wozu die Zielgröße an passend gewählten Frequenzpunkten bestimmt wird und Zwischenwerte durch Interpolationstechniken gewonnen werden. Stark variierende Frequenzgänge der Streuquerschnitte, die insbesondere bei kleinen Wellenzahlen auftreten, erfordern bei einer gegebenen Genauigkeit eine hinreichend feine Abtastung und können folglich zu einer hohen Zahl von Frequenzpunkten führen. Da für jeden einzelnen Frequenzpunkt sowohl die Erstellung der Systemmatrix als auch die Lösung des Gleichungssystems wiederholt ausgeführt werden muss, kann schnell die Grenze der Rechenkapazität zur Erzielung der gewünschten Ergebnisse in einer akzeptablen Zeit erreicht sein, weshalb dieser Zugang in den meisten Fällen unbrauchbar ist. Als wesentlich effizienter erweist sich der Einsatz der AWE-Technik (*Asymptotic Waveform Evaluation*) in Verbindung mit der Randelementmethode im Frequenzbereich, die der Klasse der Verfahren zur Reduktion der Modellordnung angehört und ursprünglich für Zeitanalysen von VLSI-Schaltkreisen entwickelt wurde [73]. Die Grundidee beruht auf der formalen Entwicklung der elektrischen Stromdichte um einen ausgewählten Frequenzpunkt in eine TAYLOR-Reihe, deren Koeffizienten indirekt durch Vergleich mit den Momenten des Anregungsvektors, welche sich aus der Matrixgleichung ergeben, bestimmbar sind. Somit wird eine Näherung des kontinuierlichen Frequenzganges des aus dem Koeffizientenvektor der Flächenstromdichte berechenbaren Streuquerschnittes in einem bestimmten Bereich erzielt.

Als Ausgangspunkt dient die aus der Diskretisierung einer der genannten Integralgleichung resultierende Matrixgleichung

$$\underline{\mathbf{Z}}(\underline{k}) \underline{\mathbf{i}}(\underline{k}) = \underline{\mathbf{u}}(\underline{k}) \quad (2.6.14)$$

mit der komplexen Wellenzahl  $\underline{k}$ , die den abzutastenden Parameter repräsentiert. Es soll angenommen werden, dass die TAYLOR-Reihe des Lösungsvektors um den Entwicklungspunkt  $\underline{k}_0$

$$\underline{\mathbf{i}}(\underline{k}) = \sum_{q=0}^{\infty} \underline{\mathbf{m}}_q (\underline{k} - \underline{k}_0)^q, \quad \text{mit: } \underline{\mathbf{m}}_q = \frac{(\partial_{\underline{k}}^q \underline{\mathbf{i}})(\underline{k}_0)}{q!} \quad (2.6.15)$$

im interessierenden Wellenzahlenbereich konvergiert. Gleichung (2.6.15) ist dabei als komponentenweise Entwicklung des Lösungsvektors zu verstehen. Das aus den TAYLOR-Koeffizienten bestehende  $N$ -Tupel  $\underline{\mathbf{m}}_q$  wird aus der formalen Lösung von Gleichung (2.6.14)

$$\underline{\mathbf{i}}(\underline{k}) = \underline{\mathbf{Z}}^{-1}(\underline{k}) \underline{\mathbf{u}}(\underline{k}) \quad (2.6.16)$$

bestimmt. Differentiation der rechten Seite von Gleichung (2.6.16) liefert unter Berücksichtigung der Identität

$$\partial_{\underline{k}}(\underline{\mathbf{Z}}^{-1}) = -\underline{\mathbf{Z}}^{-1}(\partial_{\underline{k}} \underline{\mathbf{Z}}) \underline{\mathbf{Z}}^{-1} \quad (2.6.17)$$

und nach einigen elementaren Umformungen eine Rekursionsbeziehung für die gesuchten

Momente [73]

$$\underline{\mathbf{m}}_q = \begin{cases} \underline{\mathbf{Z}}^{-1}(\underline{k}_0) \underline{\mathbf{u}}(\underline{k}_0) & ; q = 0 \\ \underline{\mathbf{Z}}^{-1}(\underline{k}_0) \left[ \frac{(\partial_k^q \underline{\mathbf{u}})(\underline{k}_0)}{q!} - \sum_{p=1}^q \frac{(\partial_k^p \underline{\mathbf{Z}})(\underline{k}_0)}{p!} \underline{\mathbf{m}}_{q-p} \right] & ; q \geq 1 \end{cases} \quad (2.6.18)$$

Begnügt man sich mit einer beschränkten Anzahl von Reihengliedern, die von der gewünschten Genauigkeit abhängt, ist die gesuchte elektrische Flächenstromdichte bei Vorliegen der Momente für jede beliebige Wellenzahl innerhalb des interessierenden Bereiches einfach berechenbar, ohne das Problem erneut lösen zu müssen. Allerdings erfordert diese Technik einen deutlich höheren Speicherbedarf, weil zur Bestimmung der Momente sämtliche Matrizen verfügbar sein müssen. Des Weiteren beansprucht die Aufstellung der einzelnen Matrizen ein nicht unerhebliches Maß an Rechenzeit. Es sei darauf hingewiesen, dass bei Verwendung einer direkten Strategie zur Lösung linearer Gleichungssysteme die Systemmatrix nur einmal invertiert oder einer LU-Zerlegung unterzogen werden muss. Demgegenüber ist bei Einsatz eines iterativen Lösungsverfahrens aufgrund der variablen rechten Seite für jedes gesuchte Moment ein Gleichungssystem zu lösen.

Reihenentwicklungen dieser Art zeigen für den hier betrachteten Anwendungsfall häufig nur ein mäßiges Konvergenzverhalten, was zur Wahl eines hohen Polynomgrades zwingt. Zudem besitzen sie meist einen sehr begrenzten Konvergenzbereich, wodurch dieses Verfahren in der vorliegenden Form schnell an Attraktivität verliert. Aus den genannten Gründen wird deshalb bevorzugt auf eine rationale PADÉ<sup>27</sup>-Entwicklung zurückgegriffen, die nicht nur wesentlich bessere Approximationseigenschaften besitzt, sondern auch insbesondere Funktionen mit Polstellen hervorragend nachbilden kann [73]. Definitionsgemäß stellt eine PADÉ-Approximation eine rationale Funktion dar, deren Potenzreihe mit einer gegebenen Potenzreihe bis zur höchstmöglichen Ordnung übereinstimmt. Die Koeffizienten der rationalen Funktion, die als Approximierte der einzelnen Komponenten des Lösungsvektors

$$\underline{i}_n(\underline{k}) = \frac{\sum_{i=0}^L \underline{a}_i^{(n)} (\underline{k} - \underline{k}_0)^i}{\sum_{j=0}^M \underline{b}_j^{(n)} (\underline{k} - \underline{k}_0)^j}, \quad \text{mit: } \underline{b}_0^{(n)} \equiv 1 \quad (2.6.19)$$

dienen soll, werden durch Anpassung an die durch Gleichung (2.6.18) festgelegten Momente der TAYLOR-Entwicklung vom Grad  $Q = L + M$  bestimmt, wobei  $L$  den Polynomgrad des Zählers und  $M$  den des Nenners der PADÉ-Approximation angibt. Daraus resultiert ein  $M \times M$  Gleichungssystem zur Bestimmung der Koeffizienten des Nennerpolynoms

$$- \begin{pmatrix} \underline{m}_L^{(n)} & \underline{m}_{L-1}^{(n)} & \cdots & \underline{m}_{L-M+1}^{(n)} \\ \underline{m}_{L+1}^{(n)} & \underline{m}_L^{(n)} & \cdots & \underline{m}_{L-M+2}^{(n)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \underline{m}_{L+M-1}^{(n)} & \underline{m}_{L+M-2}^{(n)} & \cdots & \underline{m}_L^{(n)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{b}_1^{(n)} \\ \underline{b}_2^{(n)} \\ \vdots \\ \underline{b}_M^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{m}_{L+1}^{(n)} \\ \underline{m}_{L+2}^{(n)} \\ \vdots \\ \underline{m}_{L+M}^{(n)} \end{pmatrix}, \quad (2.6.20)$$

wobei der Einfachheit halber  $\underline{m}_l = 0$  für  $l < 0$  vereinbart sein soll. Aus diesem Ergebnis

<sup>27</sup>Henri Eugène Padé, 1863–1953, französischer Mathematiker

können anschließend die Koeffizienten des Zählerpolynoms mit Hilfe der Vorschrift

$$\underline{a}_i^{(n)} = \sum_{j=0}^i \underline{b}_j^{(n)} \underline{m}_{i-j}^{(n)}; \quad 0 \leq i \leq L \quad (2.6.21)$$

berechnet werden.

Es hat sich in der Praxis gezeigt, dass bei gegebenem Polynomgrad  $Q$  der TAYLOR-Reihenentwicklung der Fehler in der PADÉ-Approximation am kleinsten ist, wenn der Grad des Zählers gleich oder um Eins höher als der Grad des Nenners ist. Für den Fall  $M = 0$  stimmt die PADÉ-Entwicklung mit der TAYLOR-Reihe überein.

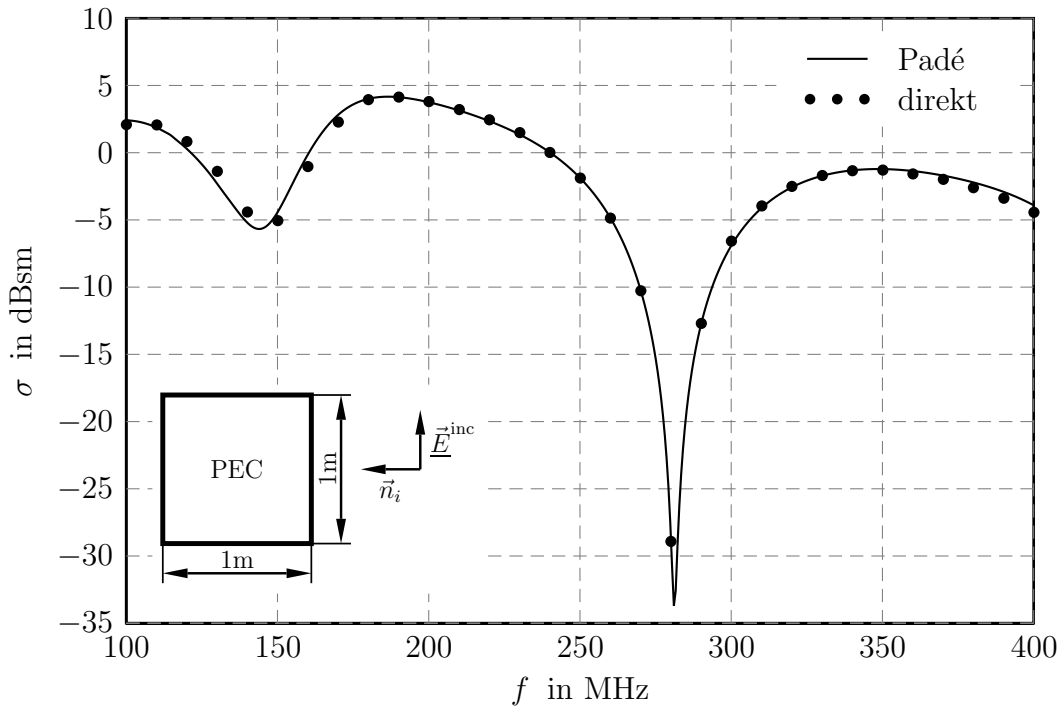


Abbildung 2.11: Monostatischer Rückstreuquerschnitt einer quadratischen Platte mit den Abmessungen  $1\text{m} \times 1\text{m}$  bei bezüglich der Plattenoberfläche parallelem Einfall einer horizontal polarisierten ebenen Welle ( $\vartheta_i = 90^\circ, \varphi_i = 0^\circ, \eta_i = 90^\circ$ ). Gezeigt ist der mit Hilfe einer Padé-Approximation der Ordnung  $(6, 5)$  um den Entwicklungspunkt  $f = 250 \text{ MHz}$  ermittelte frequenzabhängige Verlauf des Rückstreuquerschnittes. Zum Vergleich sind zusätzlich an ausgewählten Frequenzpunkten direkt berechnete Werte eingetragen.

Die zur Bestimmung der Koeffizienten benötigten Ableitungen der einzelnen Anteile zur Systemmatrix gemäß Gleichung (2.3.26) bezüglich der Wellenzahl können explizit in der kompakten Form

$$\begin{aligned} (\partial_k^q Z_{mn}^{\pm\pm})(\underline{k}) = & j\underline{k}Z_0 \frac{l_m^\pm l_n^\pm}{4A_m^\pm A_n^\pm} \int \int_{T_m^\pm T_n^\pm} \left[ (\vec{r} - \vec{r}_m^\pm) \cdot (\vec{r}' - \vec{r}_n^\pm) \left( 1 - \frac{q}{j\underline{k} \|\vec{r} - \vec{r}'\|} \right) \cdots \right. \\ & \left. - \frac{4}{\underline{k}^2} \sum_{p=0}^q \frac{q!}{(q-p)!} \frac{1}{(j\underline{k})^p \|\vec{r} - \vec{r}'\|^p} \right] (-j)^q \|\vec{r} - \vec{r}'\|^q \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') dA(\vec{r}) dA(\vec{r}') \end{aligned} \quad (2.6.22)$$

ausgedrückt werden [26]. Ebenso lässt sich für die Ableitungen des Anregungsvektors ein Ausdruck der Gestalt

$$(\partial_k^q \underline{u}_m^\pm)(\underline{k}) = \underline{E}_0 \frac{l_m^\pm}{2A_m^\pm} \int_{T_m^\pm} (-j)^q (\vec{n}_i \cdot \vec{r})^q [\vec{p}_i + jv(\vec{p}_i \times \vec{n}_i)] \cdot (\vec{r} - \vec{r}_m^\pm) \exp(-jk\vec{n}_i \cdot \vec{r}) dA(\vec{r}) \quad (2.6.23)$$

finden. In Abbildung 2.11 ist der mittels einer PADÉ-Approximation der Ordnung  $L = 6$  und  $M = 5$  numerisch ermittelte Rückstreuquerschnitt einer aus ideal elektrisch leitfähigem Material bestehenden quadratischen Platte dargestellt. Zur Illustration der hohen Güte dieser Näherung in dem betrachteten Frequenzbereich ist zusätzlich das Ergebnis der direkten Berechnung des Rückstreuquerschnittes an ausgewählten Frequenzpunkten angegeben.



# Kapitel 3

## Finite Symmetriegruppen

*Zur formalen Charakterisierung der Symmetrie von Objekten sowie zur Feststellung der daraus resultierenden Konsequenzen erweisen sich gruppentheoretische Methoden als unentbehrliches mathematisches Werkzeug. Nach einem kurzen Exkurs über die enorme Bedeutung der Gruppen- und Darstellungstheorie in vielen anwendungsbezogenen Zweigen der Naturwissenschaft werden im nächsten Abschnitt die in der vorliegenden Arbeit verwendeten Grundbegriffe und Definitionen aus dieser mathematischen Disziplin eingeführt und erläutert. Darauf aufbauend wird im letzten Abschnitt eine als harmonische Analyse auf Gruppen bekannte Methodik abgeleitet, die ähnlich zur klassischen Fourier-Transformation eine Zerlegung von Funktionen in Komponenten unterschiedlichen Symmetrietyps ermöglicht und damit die Voraussetzung für eine Vereinfachung von elektromagnetischen Problemstellungen, die gewisse geometrische Symmetrien aufweisen, schafft. Die Herkunft und Bedeutung der irreduziblen Darstellungen einer finiten Symmetriegruppe, welche die Grundbausteine der abstrakten Fourier-Transformation bilden, wird in diesem Zusammenhang anhand der Untersuchung der spektralen Eigenschaften der auftretenden Symmetrieeoperatoren verdeutlicht.*

### 3.1 Symmetrie und deren Bedeutung in der Praxis

Symmetrie bedeutet Gleichmäßigkeit und kennzeichnet die Eigenschaft eines Objekts, sein Erscheinungsbild gegenüber bestimmten Transformationen nicht zu verändern. Viele in der Natur vorkommende Objekte weisen bestimmte Symmetrien auf. Die Zuweisung einer Symmetrie ist jedoch nicht auf geometrische Figuren beschränkt. Auch abstraktere Gebilde wie physikalische Gesetzmäßigkeiten und mathematische Modellgleichungen können durch eine Symmetrie gekennzeichnet sein. Je höher dabei die Symmetrie eines Objekts ist, desto vollkommener und ästhetischer erscheint es dem Betrachter.

Das Studium der Symmetrieeigenschaften eines Systems gestattet im Allgemeinen wichtige Rückschlüsse auf dessen wesentliche Eigenschaften, weshalb die Gruppen- und Darstellungstheorie mit Symmetrietransformationen als Gruppenelementen ein unverzichtbares mathematisches Hilfsmittel in vielen Bereichen der angewandten Naturwissenschaften geworden ist. Daneben kann die Berücksichtigung von Symmetrien zur erheblichen Vereinfachung der Lösungsfindung eines Problems sowie zum Verstehen und zur Klassifizierung

der gewonnenen Ergebnisse beitragen. In vielen Fällen ist es sogar unmöglich, ohne gruppentheoretische Methoden überhaupt eine Lösung zu erzielen.

Der enge und untrennbare Zusammenhang zwischen den Symmetrien des Anschauungsraums und fundamentalen Naturgesetzen manifestiert sich in eindrucksvoller Weise im berühmten NOETHER<sup>1</sup>-Theorem. Es besagt, dass jeder kontinuierlichen Symmetrie eines Systems eine Erhaltungsgröße zugeordnet ist und umgekehrt. Die Invarianz physikalischer Prozesse unter Zeittranslation, die auf der Beobachtung beruht, dass der Zeitpunkt des Beginns eines Vorganges unter gleichen Bedingungen nichts an dessen Verlauf ändert, verlangt den Erhalt der Gesamtenergie innerhalb eines abgeschlossenen Systems. Weiterhin drückt die Homogenität und Isotropie des euklidischen Raums und damit dessen Invarianz gegenüber Verschiebung und Drehung die freie Wahl der Lage und der Richtung des Bezugssystems aus und fordert als Konsequenz den Erhalt des Impulses und Drehimpulses.

Praktische Relevanz erlangte die Gruppentheorie in Verbindung mit Symmetrien erstmals in der Kristallografie als Teilgebiet der Mineralogie [69]. Reale Kristallstrukturen werden vereinfacht als unendliche Gitter angenommen, die durch periodische Fortsetzung einer Elementarzelle in alle drei Raumrichtungen entstehen. Mathematisch wird die Symmetrie von Kristallgittern durch sogenannte kristallografische Raumgruppen charakterisiert, deren Elemente die Gitterstruktur in sich selbst überführen und sowohl diskrete Translationen als auch Symmetrietransformationen diskreter Punktgruppen, wie beispielsweise räumliche Drehungen und Spiegelungen, beinhalten. Aus der symmetriebezogenen Analyse von Kristallsystemen lassen sich sowohl mögliche Symmetrieachsen kristallografischer Polyeder als auch realisierbare Kristallkonfigurationen ableiten sowie Aussagen über Härte und Spaltbarkeit eines Kristalls treffen.

Gruppentheoretische Methoden sind auch in der Chemie bei der Untersuchung von Molekülen, die als räumliche Punktsysteme aufgefasst werden, nicht mehr wegzudenken. Die Darstellungstheorie erlaubt die Einteilung der Eigenschwingungen eines Moleküls bezüglich seines Verhaltens unter bestimmten Symmetrietransformationen in Symmetrieklassen ohne explizite Auswertung der Schwingungsgleichung, womit Aussagen über die optische Aktivität des betrachteten Moleküls aus alleiniger Kenntnis der zugrunde liegenden Symmetriegruppe getroffen werden können. Diese sind zum Beispiel in der Schwingungsspektroskopie sowohl zur Strukturanalyse oder Identifikation von Substanzen als auch zur Vorhersage physikalischer Eigenschaften von Interesse.

Zu den bedeutendsten Anwendungsgebieten der Gruppentheorie zählt die Quantenmechanik, in der die Struktur und Wechselwirkung der Materie im atomaren und subatomaren Bereich untersucht wird. Der Zustand eines Quantenobjekts wird durch eine im Allgemeinen orts- und zeitabhängige Wellenfunktion, die der SCHRÖDINGER<sup>2</sup>-Gleichung genügen muss, beschrieben. Im stationären Fall liegt ein Eigenwertproblem vor, dessen Lösung auf die möglichen Energieeigenwerte mit den zugehörigen Energiezuständen des Quantensystems führt. Aus den Symmetrieeigenschaften des Systems kann auf den Entartungsgrad der einzelnen Energieniveaus geschlossen oder die Art ihrer Aufspaltung unter dem Einfluss von symmetrischen und asymmetrischen Störungen analysiert werden. Des Weiteren liefert die Bestimmung der Symmetrieelemente wichtige Anhaltspunkte für das

---

<sup>1</sup>Amalie „Emmy“ Noether, 1882–1935, deutsche Mathematikerin

<sup>2</sup>Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger, 1887–1961, österreichischer Physiker



Übergangsverhalten zwischen zwei verschiedenen Energiezuständen des Quantensystems in Form von Auswahlregeln für die Übergangsmatrizen.

Wie bereits angedeutet, bildet die Gesamtheit der Symmetrieeigenschaften des euklidischen Raums das mathematische Äquivalent zur postulierten Unabhängigkeit der in ihm ablaufenden physikalischen Prozesse und Gesetzmäßigkeiten von der Wahl des Bezugssystems. Die damit einhergehende Invarianz gegenüber bestimmten Koordinatentransformationen muss sich letztendlich auch in der mathematischen Beschreibung der Phänomene wiederfinden. Folglich sind bei der theoretischen Modellbildung und Formulierung der problembeschreibenden Gleichungen entsprechende Zusatzbedingungen im Rahmen der getroffenen Modellannahmen mit einzubeziehen. Zum Erhalt eines mit der physikalischen Realität verträglichen Modells müssen die Modellgleichungen unter Beachtung der Transformationseigenschaften der eingeführten Modellgrößen gegenüber räumlicher Verschiebung, Drehung und Spiegelung sowie, wenn die Homogenität der Zeit hinzugenommen wird, unter Zeitverschiebung ihre Form beibehalten. Diese wichtige Eigenschaft mathematischer Modellgleichungen bildet die Grundlage der in den nächsten Abschnitten vorgestellten Methode der Symmetriezellenreduktion in der numerischen Feldberechnung. Es soll an dieser Stelle angemerkt werden, dass bei der Berücksichtigung einer möglichen Invarianz gegenüber Zeitspiegelung besondere Vorsicht geboten ist. Irreversible Vorgänge, wie Diffusions- und Wärmeleitprozesse, können selbstverständlich bei Zeitspiegelung nicht in umgekehrter Weise ablaufen, womit die entsprechenden Modellgleichungen keinesfalls diese Symmetrieeigenschaft aufweisen. Im Gegensatz dazu ist die ungedämpfte Wellengleichung invariant gegenüber Zeitumkehr, weil bei diesem Vorgang keine Dissipation stattfindet.

## 3.2 Grundlagen und Begriffsdefinitionen

### 3.2.1 Symmetrietransformationen

#### 3.2.1.1 Transformationen auf dem Ortsraum

Grundlegend für die Lösung physikalischer Problemstellungen ist die Identifikation aller relevanten Größen und Gesetzmäßigkeiten und deren adäquate Beschreibung in Form von mathematischen Symbolen, Strukturen und Gleichungen. Für den visuell erfassbaren Anschauungsraum, in dem alle in der Natur beobachtbaren physikalischen Prozesse ablaufen, erweist sich die euklidische Geometrie als angemessene Beschreibungsmöglichkeit. Aus Sicht der Vektoralgebra wird jeder Raumpunkt als Ortsvektor

$$\vec{r} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z, \quad \vec{r} \in D_0 \quad (3.2.1)$$

eines dreidimensionalen reellwertigen Vektorraums mit der kartesischen Basis  $\{\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z\}$  aufgefasst. Die Koeffizienten dieser Basisvektoren bilden den Vektor der Ortskoordinaten

$$\mathbf{r} = (x, y, z)^T, \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3. \quad (3.2.2)$$

Geometrische Strukturen wie Kurven, Flächen und Körper stellen im diesem Kontext somit durch Vektoren repräsentierte Punktmengen dar, die häufig als Untermannigfaltigkeiten angesehen werden können. Durch das Standardskalarprodukt auf diesem Vektorraum,

das über die postulierte Orthogonalität der kartesischen Einheitsvektoren

$$\langle \vec{e}_i, \vec{e}_j \rangle := \delta_{ij}, \quad i, j \in \{x, y, z\} \quad (3.2.3)$$

definiert ist, wird zugleich die euklidische Norm  $\|\vec{r}\| = \sqrt{\langle \vec{r}, \vec{r} \rangle}$  festgelegt, die wiederum selbst eine Metrik  $R(\vec{r}, \vec{r}') = \|\vec{r} - \vec{r}'\|$  induziert, womit Längen und Winkel messbar sind. Hier wird bewusst eine strikte Unterscheidung zwischen abstrakten Vektorelementen  $\vec{r}$  und deren Koordinatendarstellungen  $\mathbf{r}$  in Form geordneter Zahlentripel vorgenommen. Die von der konkreten Festlegung einer Basis abhängigen Koordinatenvektoren sind Realisierungen abstrakter Vektoren und eignen sich vornehmlich zur abschließenden Umsetzung der Algorithmen auf einer elektronischen Datenverarbeitungsanlage. Für eine theoretische Behandlung ist die Verwendung der abstrakten Beschreibung wesentlich vorteilhafter, weil sie koordinatenfrei und damit allgemein gültig ist. Ihr Vorzug tritt besonders deutlich bei der Definition linearer Operatoren auf Funktionenräumen und deren Matrixdarstellungen hervor.

Unter einer Symmetrietransformation im Zusammenhang mit der euklidischen Geometrie wird allgemein eine affine Abbildung  $g : D_0 \rightarrow D_0$  verstanden, die den gesamten Ortsraum auf sich selbst abbildet und zusätzlich die Eigenschaft besitzt, Längen und Winkel zu erhalten. Zu solchen Kongruenzabbildungen zählen generell räumliche Verschiebungen, Drehungen, Spiegelungen sowie die aus deren Hintereinanderausführung resultierenden Operationen wie Drehspiegelung, Inversion und Gleitspiegelung. Sie werden auch Bewegungen des euklidischen Raums genannt, da sie den Ortsraum invariant lassen. In dieser Arbeit werden jedoch ausschließlich räumlich beschränkte Rechengebiete betrachtet, aus denen Symmetrietransformationen ebenfalls nicht hinausführen dürfen. Durch die Einschränkung auf Teilmengen des Ortsraumes vermindert sich zwangsläufig die Zahl der zulässigen Symmetrieoperationen abhängig von der konkreten Gestalt der Struktur. Folglich wird einem geometrischen Objekt eine bestimmte Symmetrie zugesprochen, wenn es durch die zugehörige Transformation nicht verändert wird. Translationen und deren Komposita mit anderen Operationen scheiden daher grundsätzlich bei räumlich beschränkten Gebieten aus, so dass sich im weiteren Verlauf auf die verbleibenden linearen Symmetrietransformationen konzentriert werden kann, die hier durch die in der Chemie und Kristallografie vorwiegend verwendete SCHÖNFLIES<sup>3</sup>-Symbolik gekennzeichnet werden sollen:

- Eine diskrete *Drehung* um den  $n$ -ten Teil des Vollwinkels wird durch  $C_n$  symbolisiert, die  $n$ -zählige Drehachse als zugehöriges Symmetrieelement erhält das Symbol  $C_n$ . Die Achse mit der höchsten Zähligkeit wird Hauptdrehachse genannt und üblicherweise mit der  $z$ -Achse des kartesischen Koordinatensystems gleichgesetzt.
- *Spiegelungen* an Ebenen, auch Reflexionen genannt, werden allgemein durch das Symbol  $\sigma$  ausgedrückt, wobei die Lage der Spiegelebene  $\sigma$  bezüglich der Hauptdrehachse durch einen Index gekennzeichnet wird. Ist die Hauptdrehachse in der Spiegelebene enthalten, wird die Spiegelung mit  $\sigma_v$  oder  $\sigma_d$  bezeichnet, steht sie senkrecht dazu, erhält sie die Bezeichnung  $\sigma_h$ .
- Eine *Drehspiegelung*  $S_n$  resultiert aus einer diskreten Drehung mit anschließender Spiegelung an der zur Drehachse senkrechten Ebene. Drehachse und Spiegelebene bilden zusammen die Drehspiegelachse  $S$ .

---

<sup>3</sup>Arthur Moritz Schönflies, 1853–1928, deutscher Mathematiker

- Die *Inversion* oder Punktspiegelung  $i$  kann als Sonderfall der Drehspiegelung an einer beliebigen 2-zähligen Drehspiegelachse aufgefasst werden. Der Schnittpunkt von Drehachse und Spiegelebene charakterisiert das Inversionszentrum  $\mathbf{i}$ . Ebenso lässt sich diese Operation aus drei Spiegelungen an zueinander senkrechten Spiegelebenen mit dem gemeinsamen Punkt als Inversionszentrum zusammensetzen.

Hinzu kommt abschließend die Identität  $E$  als triviale Symmetrieeoperation, die jedes Objekt unverändert lässt. Zu beachten ist, dass bestimmte Operationen wie Reflexion, Inversion und Drehspiegelung eine Änderung der Orientierung eines Simplex im Ortsraum bewirken und somit im Gegensatz zur Drehung keine eigentliche Bewegung des Ortsraums gestatten. Symmetrieelemente sind geometrische Objekte, die eine koordinatenfreie Spezifizierung der Symmetrieeoperation ermöglichen. Da sie, mit Ausnahme der Drehspiegelachse, die Menge derjenigen Punkte ist, die gegenüber der zugehörigen Transformation ortsfest bleiben, können sie zum Auffinden der Symmetrien einer geometrischen Struktur und zur Bestimmung der zugehörigen Symmetriegruppe hilfreich sein.

Die Definition von Symmetrietransformationen kann aus zwei verschiedenen Sichtweisen erfolgen, die zwar auf unterschiedliche, aber vollkommen äquivalente Darstellungen dieser Operatoren führen. Vom passiven Standpunkt aus werden die Objekte als fest angesehen und das Koordinatensystem transformiert, so dass eine Symmetrietransformation gleichbedeutend mit einem Basiswechsel der Koordinatendarstellung eines Vektorobjekts ist. In dieser Arbeit wird sich der aktiven Betrachtungsweise angeschlossen, bei der das Objekt bei fixiertem Koordinatensystem, was einer fest gewählten Basis des Vektorraums entspricht, transformiert wird, womit die Symmetrieeoperatoren eine lineare Abbildung des Ortsraums auf sich selbst vermitteln. Entsprechend der WIGNER<sup>4</sup>-Konvention soll die Transformation  $g$  eines Vektorobjekts durch die Wirkung des Operators auf die Basisvektoren erklärt werden [93]:

$$g\vec{r} := x(g\vec{e}_x) + y(g\vec{e}_y) + z(g\vec{e}_z). \quad (3.2.4)$$

Die Bilder der Einheitsvektoren sind wegen der vorausgesetzten Invarianz des Vektorraums gegenüber der Symmetrietransformation in die ursprüngliche Basis entwickelbar:

$$g\vec{e}_j = \sum_{i \in \{x,y,z\}} [\mathbf{D}(g)]_{ij} \vec{e}_i, \quad j \in \{x,y,z\}, \quad [\mathbf{D}(g)]_{ij} \in \mathbb{R}. \quad (3.2.5)$$

Im Raum der Koordinatenvektoren können die Transformationen der Ortskoordinaten als reelle  $(3 \times 3)$ -Matrizen  $\mathbf{D}(g)$  mit den Komponenten  $[\mathbf{D}(g)]_{ij}$  ausgedrückt werden. Wegen der abstandserhaltenden Eigenschaft der Symmetrieeoperatoren  $g$  sind diese Matrizen orthogonal und werden, weil sie diese linearen Operatoren repräsentieren, als Darstellungsmatrizen bezeichnet. Es ist damit evident, dass deren konkreter Aufbau vom gewählten Koordinatensystem abhängt.

Durch die Koordinatenabbildung

$$\kappa\vec{r} = (\langle \vec{e}_x, \vec{r} \rangle, \langle \vec{e}_y, \vec{r} \rangle, \langle \vec{e}_z, \vec{r} \rangle)^T, \quad (3.2.6a)$$

$$\kappa^{-1}\mathbf{r} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z, \quad (3.2.6b)$$

---

<sup>4</sup>Eugene Paul Wigner, 1902–1995, ungarisch-amerikanischer Physiker und Nobelpreisträger

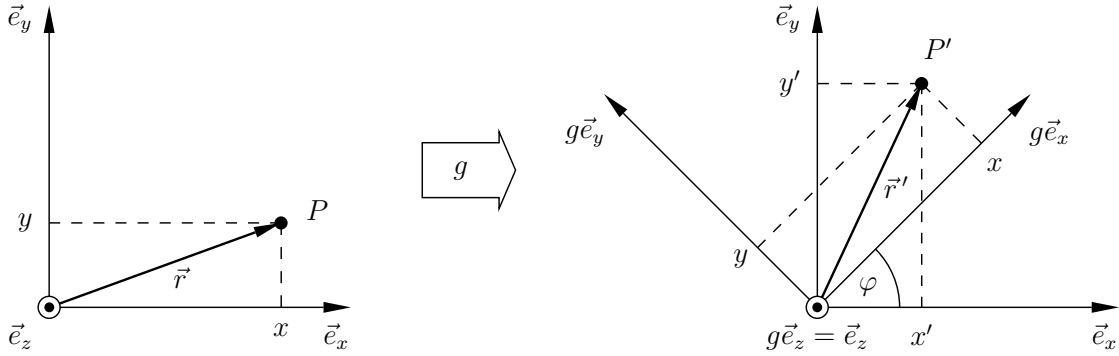


Abbildung 3.1: Veranschaulichung von geometrischen Symmetrietransformationen am Beispiel der Drehung des Ortsvektors um die  $z$ -Achse. Bei dieser Operation wird das geometrische Objekt bei fixiertem Koordinatensystem in mathematisch positivem Sinn gedreht.

die den Ortsraum in eindeutiger Weise mit dem euklidischen Raum in Beziehung setzt, wird außerdem eine Abbildung

$$\mathbf{D} : g \mapsto \mathbf{D}(g), \quad \mathbf{D} : G \rightarrow \mathbf{D}(G) \subset O(3) \quad \text{mit: } \mathbf{D}(g) = \kappa g \kappa^{-1} \quad (3.2.7)$$

der Menge der Symmetrieelemente in die Menge der reellen, orthogonalen Matrizen vermittelt. Da jede Symmetrietransformation eindeutig umkehrbar ist, existiert zu der korrespondierenden Darstellungsmatrix wegen der Isomorphie zwischen  $D_0$  und  $\mathbb{R}^3$  auch eine eindeutig bestimmte Inverse  $\mathbf{D}(g^{-1}) = \mathbf{D}(g)^{-1}$ , was auch im Einklang mit den Eigenschaften orthogonaler Matrizen steht.

Die erläuterten funktionellen Zusammenhänge sind in dem nachfolgend gezeigten kommutativen Diagramm verdeutlicht:

$$\begin{array}{ccc} \vec{r} \in D_0 & \xrightleftharpoons[g^{-1}]{g} & \vec{r}' \in D_0 \\ \uparrow \kappa^{-1} \quad \downarrow \kappa & & \uparrow \kappa^{-1} \quad \downarrow \kappa \\ \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 & \xrightleftharpoons[\mathbf{D}(g)^{-1}]{\mathbf{D}(g)} & \mathbf{r}' \in \mathbb{R}^3 \end{array} \quad (3.2.8)$$

Abbildung 3.1 zeigt beispielhaft die Drehung eines durch den Ortsvektor  $\vec{r}$  repräsentierten Punktes  $P$  um einen Winkel  $\varphi$  mit der  $z$ -Achse als Symmetrieelement. Definiert wird diese Drehung durch die Transformationseigenschaft der Einheitsvektoren, wobei der Ortsvektor mitgeführt wird. Die Koordinaten des gedrehten Ortsvektors  $\mathbf{r}'$  bezüglich des fixierten Koordinatensystems resultieren aus der Multiplikation der Drehmatrix  $\mathbf{D}(g)$  mit dem Ausgangsvektor  $\mathbf{r}$ :

$$\mathbf{r}' = \mathbf{D}(g)\mathbf{r}, \quad \text{mit: } \mathbf{D}(g) = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.2.9)$$

An dieser Stelle sei angemerkt, dass die Inverse dieser Drehmatrix der Darstellungsmatrix des Drehoperators bei passiver Betrachtungsweise mit festgehaltenem Objekt entspricht.

Beide Sichtweisen unterschieden sich in diesem Beispiel nur durch die entgegengesetzte Orientierung des Drehsinnes.

### 3.2.1.2 Induzierte Transformationen auf Funktionenräumen

Symmetrietransformationen lassen sich nicht nur für geometrische Gebilde, sondern auch allgemein für beliebige, abstrakte Objekte, insbesondere für Skalar- und Vektorfelder, erklären. Dadurch wird es überhaupt erst möglich, Symmetrien bei der Lösung physikalischer Problemstellungen ausnutzen zu können oder deren Einfluss auf das Systemverhalten zu untersuchen. Wie beim Ortsraum muss auch hier vorausgesetzt werden, dass die Anwendung von Symmetrietransformationen nicht aus den betrachteten Funktionenräumen hinausführt.

Bei der Suche nach einer sinnvollen Definition derartiger Operatoren ist es notwendig, zuerst das Transformationsverhalten der mathematischen Modellgrößen unter physikalischen Aspekten genau zu analysieren und gegebenenfalls zu postulieren. So wird von der physikalisch sinnvollen Annahme ausgegangen, dass aus passiver Sichtweise sowohl ruhende als auch bewegte elektrische Ladungen, darauf wirkende Kräfte sowie elektrische und magnetische Energiedichten beim Übergang zu einem anderen, festen Koordinatensystem ihre skalaren bzw. vektoriellen Eigenschaften wie Größe und Richtung grundsätzlich beibehalten. Vom aktiven Standpunkt aus bedeutet dies, dass grafische Darstellungen skalarer und vektorieller Felder genau wie geometrische Objekte in anschaulicher Weise gedreht oder gespiegelt werden.

In Abbildung 3.2 ist eine Punktladung  $Q$  gezeigt, die sich mit der Geschwindigkeit  $\vec{v}$  in  $z$ -Richtung bewegt und auf die infolge eines elektromagnetischen Feldes eine Kraft

$$\vec{F} = Q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) = \vec{F}_C + \vec{F}_L \quad (3.2.10)$$

wirkt. Eine eigentliche Drehung der Feldgrößen kann durch Drehung des Koordinatensystems unter Mitführung der Objekte erreicht werden. Es ist leicht erkennbar, dass die Feldvektoren im betrachteten Raumpunkt bezüglich des ursprünglichen Koordinatensystems selbst auch gedreht sind, d.h. sie transformieren sich in gleicher Weise wie der Ortsvektor.

Anders verhält es sich dagegen bei der in Abbildung 3.3 gezeigten Spiegelung dieser Anordnung an der Ebene  $x = 0$ . Kräfte und Ladungen werden unverändert mit dem Koordinatensystem mitgeführt. Der COULOMBSche<sup>5</sup> Anteil im Kraftgesetz (3.2.10) bleibt bei einer Spiegelung des elektrischen Feldstärkevektors auch weiterhin erhalten, zur Gewährleistung der Invarianz des LORENTZ<sup>6</sup>-Anteils muss jedoch, bedingt durch den geänderten Orientierungssinn des Koordinatensystems, der magnetische Flussdichtevektor sein Vorzeichen ändern. Elektrische Feldstärke und magnetische Flussdichte transformieren sich somit unter Spiegelung auf unterschiedliche Weise. Größen wie die magnetische Flussdichte, die bei Inversion und Spiegelung ihr Vorzeichen ändern und sich somit nicht wie gewöhnliche Vektoren im physikalischen Sinne transformieren, werden deshalb als Pseudovektoren<sup>7</sup>

<sup>5</sup>Charles Augustin Coulomb, 1736–1806, französischer Physiker

<sup>6</sup>Hendrik Antoon Lorentz, 1853–1928, niederländischer Mathematiker und Physiker

<sup>7</sup>Die Einführung von Pseudovektoren ließe sich vollständig vermeiden, wenn die sie beschreibenden physikalischen Größen als antisymmetrische Tensoren zweiter Stufe aufgefasst würden.

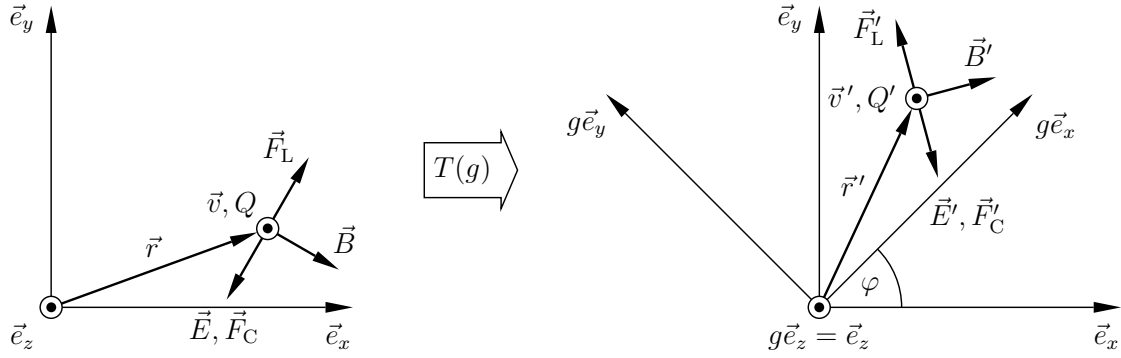


Abbildung 3.2: Grafische Veranschaulichung der Drehung von Skalar- und Vektorfeldern. Diese Operation wird durch Drehung des Koordinatensystems unter Mitführung der Feldgrößen bewirkt. Gegenüber dem ursprünglichen Bezugssystem erscheinen die Feldvektoren selbst auch gedreht.

bezeichnet. Aus diesem Beispiel lässt sich schlussfolgern, dass das Kreuzprodukt aus zwei Vektorfeldern auf ein Pseudovektorfeld führt. Ebenso ist das Ergebnis des Spatprodukts von drei Vektoren ein Pseudoskalar, er ändert somit sein Vorzeichen bei einer uneigentlichen Symmetrietransformation.

Da sich vektorielle Feldwerte in jedem beliebigen Raumpunkt genau wie Ortsvektoren transformieren, kann für diese Operation der im vorherigen Abschnitt definierte Symmetriepoperator  $g$  herangezogen werden. Skalare Feldwerte bleiben unter Symmetrietransformationen unverändert. Die bereits eingeführten Abbildungsvorschriften für Elemente des Ortsraums induzieren demzufolge Symmetrietransformationen auf den Räumen der skalar- und vektorwertigen Funktionen, wie aus dem folgenden kommutativen Diagramm anschaulich hervorgeht:

$$\begin{array}{ccc}
 \vec{r} \in D_0 & \xrightarrow{\Phi} & \Phi(\vec{r}) \in \mathbb{C} \\
 \uparrow g^{-1} & & \uparrow 1 \\
 \vec{r}' \in D_0 & \xrightarrow{T(g)\Phi} & \Phi'(\vec{r}') \in \mathbb{C} \\
 \downarrow g & & \downarrow 1
 \end{array}
 \qquad
 \begin{array}{ccc}
 \vec{r} \in D_0 & \xrightarrow{\vec{F}} & \vec{F}(\vec{r}) \in \mathbb{C}^3 \\
 \uparrow g^{-1} & & \uparrow g^{-1} \\
 \vec{r}' \in D_0 & \xrightarrow{\vec{T}(g)\vec{F}} & \vec{F}'(\vec{r}') \in \mathbb{C}^3 \\
 \downarrow g & & \downarrow g
 \end{array}$$

Hieraus sind leicht die formalen Definitionsgleichungen für diese Operatoren ablesbar:

$$[T(g)\Phi](\vec{r}') = \Phi(g^{-1}\vec{r}'), \quad (3.2.11a)$$

$$[\vec{T}(g)\vec{F}](\vec{r}') = g[\vec{F}(g^{-1}\vec{r}')]. \quad (3.2.11b)$$

Für Pseudoskalar und Pseudovektoren gelten die gleichen Aussagen mit dem einzigen Unterschied, dass bei uneigentlichen Bewegungen des Ortsraums auf den Vorzeichenwechsel der Feldwerte zu achten ist. Diesem kann sehr elegant durch Einführung einer auf Gruppen definierten Vorzeichenfunktion

$$\text{sgn} : g \mapsto \text{sgn}(g), \quad \text{sgn} : G \rightarrow \{1, -1\} \quad (3.2.12)$$

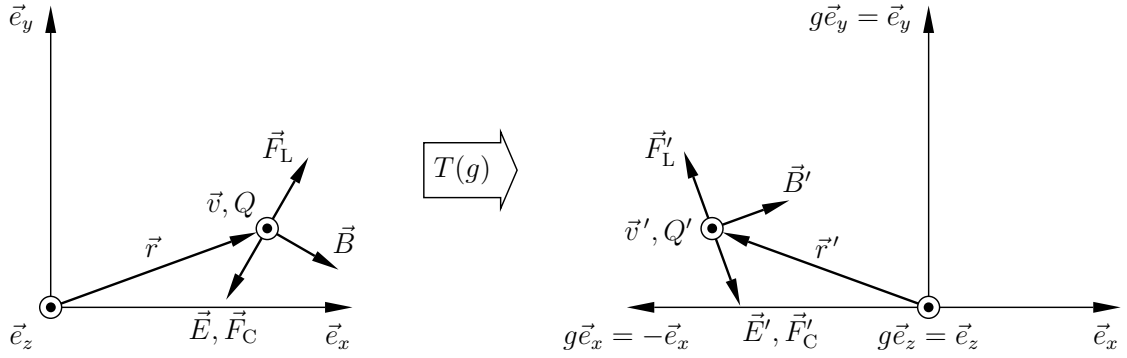


Abbildung 3.3: Grafische Veranschaulichung der Spiegelung von Skalar- und Vektorfeldern. Durch Spiegelung des Koordinatensystems unter Mitführung der Feldwerte lässt sich diese Operation definieren. Aufgrund der damit einhergehenden Änderung des Orientierungssinnes des Koordinatensystems muss der magnetische Flussdichtevektor sein Vorzeichen ändern, damit die Invarianz des Kraftgesetzes gewährleistet ist.

mit

$$\text{sgn}(g) := \begin{cases} +1 & , g \text{ eigentliche Symmetrieoperation} \\ -1 & , g \text{ uneigentliche Symmetrieoperation} \end{cases} \quad (3.2.13)$$

Rechnung getragen werden. Damit sind die Symmetrietransformationen für Pseudoskalar- und Pseudovektorfelder durch das kommutative Diagramm

$$\begin{array}{ccc} \vec{r} \in D_0 & \xrightarrow{\Phi} & \Phi(\vec{r}) \in \mathbb{C} \\ \uparrow g^{-1} & & \uparrow \text{sgn}(g^{-1}) \\ \vec{r}' \in D_0 & \xrightarrow{\tilde{T}(g)\Phi} & \Phi'(\vec{r}') \in \mathbb{C} \end{array} \quad \begin{array}{ccc} \vec{r} \in D_0 & \xrightarrow{\vec{F}} & \vec{F}(\vec{r}) \in \mathbb{C}^3 \\ \uparrow g^{-1} & & \uparrow \text{sgn}(g^{-1})g^{-1} \\ \vec{r}' \in D_0 & \xrightarrow{\tilde{T}(g)\vec{F}} & \vec{F}'(\vec{r}') \in \mathbb{C}^3 \end{array}$$

$\downarrow g$        $\downarrow \text{sgn}(g)$        $\downarrow g$        $\downarrow \text{sgn}(g)g$

festgelegt und wie folgt formal erklärt:

$$[\tilde{T}(g)\Phi](\vec{r}') = \text{sgn}(g)\Phi(g^{-1}\vec{r}'), \quad (3.2.14a)$$

$$[\tilde{T}(g)\vec{F}](\vec{r}') = \text{sgn}(g)g[\vec{F}(g^{-1}\vec{r}')]. \quad (3.2.14b)$$

Für eine konkrete Realisierung dieser Transformationen im Hinblick auf eine rechen-technische Umsetzung sind der Ortsvektor sowie alle Feldvektoren durch ihre Koordinatendarstellungen und die auf dem Ortsraum definierten Symmetrieoperatoren durch ihre Darstellungsmatrizen zu ersetzen. Die Vorzeichenfunktion lässt sich, wie leicht nachprüfbar ist, durch die Determinante der Darstellungsmatrizen

$$\text{sgn}(g) = \det [\mathbf{D}(g)] \quad (3.2.15)$$

ausdrücken.

Durch die in diesen Diagrammen gezeigten Zusammenhänge wird gleichermaßen jeder Symmetrietransformation des Ortsraumes eindeutig ein auf Funktionenräumen wirkender

Symmetriepoperator durch die Abbildung

$$T : g \mapsto T(g), \quad T : G \rightarrow T(G) \quad (3.2.16)$$

zugeordnet.

Wenn die Funktionen  $\Phi$  und  $\vec{F}$  aus diskreten Funktionenräumen stammen, können die symmetrietransformierten Funktionen, die nach Voraussetzung ebenfalls Elemente dieses Raumes sind, in die gewählte Basis entwickelt werden. Damit lassen sich analog zu den dreidimensionalen Darstellungen der geometrischen Symmetriepoperatoren auch entsprechende Matrixdarstellungen  $\mathbf{T}(g)$  für die Symmetriepoperatoren auf Funktionenräumen konstruieren, wobei der Rang der Matrizen mit der Dimension des Funktionenraums übereinstimmt. Die Spalten von  $\mathbf{T}(g)$  enthalten die Entwicklungskoeffizienten der transformierten Basisvektoren bezüglich der alten Basis.

Die eingangs geforderte Unveränderlichkeit physikalischer Gesetzmäßigkeiten gegenüber Koordinatentransformationen muss sich auf der mathematischen Modellebene durch die Vertauschbarkeit der in den Modellgleichungen auftretenden räumlichen Differentialoperatoren mit den Symmetriepoperatoren widerspiegeln. Mit den definierten Operatoren gilt:

$$\vec{T}(g)\text{grad} = \text{grad } T(g), \quad (3.2.17a)$$

$$T(g)\text{div} = \text{div } \vec{T}(g), \quad (3.2.17b)$$

$$\vec{T}(g)\text{rot} = \text{rot sgn}(g)\vec{T}(g) = \text{rot } \tilde{\vec{T}}(g). \quad (3.2.17c)$$

Hierbei ist zu berücksichtigen, dass die Bildung der Wirbel ähnlich wie beim Kreuzprodukt das Transformationsverhalten des Feldes ändert, wohingegen die restlichen Differentialoperatoren auf gleichartige Felder abbilden. Durch Einführung von Pseudogrößen und der speziellen Festlegung der Symmetriepoperatoren gemäß den Gleichungen (3.2.14) wird eine gerade Parität aller räumlichen Differentialoperatoren und damit die Inversionsinvarianz der MAXWELLSchen Gleichungen erzwungen. Unter Beachtung, dass sich die elektrische Ladungsdichte wie ein Skalar, die magnetische Ladungsdichte wie ein Pseudoskalar, die elektrische Feldstärke, Flussdichte und Stromdichte wie Vektoren, die magnetische Feldstärke, Flussdichte und Stromdichte wie Pseudovektoren transformieren, lässt sich leicht mit Hilfe der angegebenen Definitionen die Invarianz aller MAXWELLSchen Gleichungen zeigen, welche die Grundvoraussetzung für die spätere Anwendung der harmonischen Analyse auf finiten Gruppen ist. Damit das gesamte mathematische Modell, das auch die konstitutiven Gleichungen beinhaltet, die erforderliche Invarianz aufweist, müssen zudem homogene Materialverhältnisse vorliegen.

## 3.2.2 Gruppen- und Darstellungstheorie

### 3.2.2.1 Finite Symmetriegruppen

Für eine systematische und formale Vorgehensweise bei der Ausnutzung geometrischer Symmetrien sind der Gruppenbegriff sowie einige grundlegende Konzepte aus der Darstellungstheorie von zentraler Bedeutung, weshalb einige wichtige mathematische Definitionen und Sätze an den Anfang gestellt und anhand einfacher Beispiele verdeutlicht werden



sollen. Für ein tiefer gehendes Studium dieser Thematik sei auf Lehrbücher und Monografien verwiesen [25, 48, 13, 93, 70, 65], auf die sich auch die nachfolgenden Ausführungen stützen.

Eine nichtleere Menge  $G$  von Elementen  $g_1, g_2, \dots$ , auf der eine zweistellige Verknüpfung  $\circ : G \times G \rightarrow G$  erklärt ist, heißt Gruppe, wenn folgende Axiome erfüllt sind:

- A1) *Abgeschlossenheit*: Jedem geordneten Paar von Gruppenelementen wird ein eindeutig bestimmtes Element aus der Gruppe als Ergebnis dieser Verknüpfung zugeordnet:  
 $g_1 \circ g_2 \in G, \quad \forall g_1, g_2 \in G.$
- A2) *Assoziativität*: Die binäre Verknüpfung ist assoziativ:  
 $g_1 \circ (g_2 \circ g_3) = (g_1 \circ g_2) \circ g_3, \quad \forall g_1, g_2, g_3 \in G.$
- A3) *Existenz des neutralen Elements*: Die Menge enthält genau ein Element  $e$ , das als neutrales Element bezeichnet wird, so dass gilt:  
 $g \circ e = e \circ g = g, \quad \forall g \in G.$
- A4) *Existenz des inversen Elements*: Zu jedem Gruppenelement  $g$  existiert genau ein inverses Element  $g^{-1}$  mit der Eigenschaft:  
 $g \circ g^{-1} = g^{-1} \circ g = e, \quad \forall g \in G.$

Wenn zusätzlich gefordert wird, dass die Verknüpfungsvorschrift symmetrisch ist und damit das Axiom

- A5) *Kommutativität*: Die binäre Verknüpfung  $\circ$  ist vertauschbar:  
 $g_1 \circ g_2 = g_2 \circ g_1, \quad \forall g_1, g_2 \in G$

erfüllt ist, so heißt die Gruppe abelsch oder kommutativ.

Diese abstrakte algebraische Struktur erhält erst durch eine konkrete Spezifizierung der Elemente und Verknüpfungsvorschrift eine praktische Bedeutung. So bildet beispielsweise die Menge der natürlichen Zahlen mit der Addition als Verknüpfungsregel und der Null als neutralem Element eine abelsche Gruppe. Die Menge aller orthogonalen Matrizen zusammen mit der gewöhnlichen Matrixmultiplikation und der Einheitsmatrix als neutralem Element erfüllt ebenfalls die Gruppenaxiome und ist als orthogonale Gruppe  $O(3)$  bekannt.

Ist die Menge von Gruppenelementen abzählbar, liegt eine diskrete Gruppe, andernfalls eine kontinuierliche Gruppe vor. Als Gruppenordnung  $|G|$  wird die Kardinalität dieser Menge bezeichnet. In der vorliegenden Arbeit werden ausschließlich finite Gruppen, die durch eine endliche Ordnung ausgezeichnet sind, betrachtet.

Eine nichtleere Teilmenge  $G' \subseteq G$  einer Gruppe  $G$ , die die Gruppenaxiome erfüllt, heißt Untergruppe von  $G$ . Die aus dem Einselement bestehende Gruppe sowie die Gruppe  $G$  selbst bilden triviale Untergruppen von  $G$ . Nach dem Satz von LAGRANGE<sup>8</sup> teilt im Fall finiter Gruppen die Kardinalität einer Untergruppe die Gruppenordnung.

Als Periode eines Gruppenelements  $g$  wird die kleinste natürliche Zahl  $p$ , für die

$$g^p = e \tag{3.2.18}$$

---

<sup>8</sup>Joseph Louis Lagrange, 1736–1813, italienischer Mathematiker und Astronom

gilt, definiert.

Die Struktur einer finiten Gruppe lässt sich sehr elegant mittels einer Gruppentafel veranschaulichen, die detaillierte Auskunft über die Verknüpfungsregeln sämtlicher Elemente gibt. In der Kopfzeile sowie der Vorspalte dieses tabellarisch aufgebauten Schemas, auch Multiplikationstabelle genannt, sind alle Gruppenelemente aufgelistet. Jedes Feld enthält das Ergebnis der Verknüpfung des Elementes aus der Vorspalte mit dem der Kopfzeile. In jeder Spalte und Zeile tritt aufgrund des *Umordnungstheorems* jedes Gruppenelement genau ein einziges Mal auf. Zwei Zeilen oder Spalten unterscheiden sich somit nur durch eine unterschiedliche Anordnung der Gruppenelemente. Bestimmte Gruppeneigenschaften lassen sich so leicht aus der Gruppentafel ablesen. Abelsche Gruppen weisen beispielsweise eine symmetrische Gruppentafel bezüglich der Hauptdiagonalen auf, ebenso können Untergruppen sehr einfach identifiziert werden. Alternativ lässt sich der Aufbau einer Gruppe auch sehr kompakt durch die Angabe erzeugender Elemente in Verbindung mit definierenden Relationen angeben, woraus sich sämtliche Gruppenelemente durch Verknüpfen der Erzeuger, einschließlich ihrer Inversen, ergeben. Bedeutsam ist dabei das Aufsuchen eines minimalen Erzeugendensystems.

Im Zusammenhang mit der Ausreduktion von Darstellungen einer Gruppe, auf die im nächsten Unterabschnitt eingegangen wird, spielen Konjugationsklassen eine große Rolle. Zwei Gruppenelemente  $g_1, g_2$  heißen zueinander konjugiert, wenn ein Element  $g$  existiert, so dass

$$\exists g \in G : g_1 \circ g = g \circ g_2, \quad g_1, g_2 \in G \quad (3.2.19)$$

gilt. Unter einer Konjugationsklasse wird die Sequenz aller zueinander konjugierten Elemente  $K_i = \{g^{-1} \circ g_i \circ g : g \in G\}$  verstanden. Jede finite Gruppe ist eindeutig in eine bestimmte Anzahl von Konjugationsklassen, die kein Element gemeinsam haben, zerlegbar.

Von außerordentlicher Wichtigkeit in der Gruppentheorie sind ebenfalls die Begriffe des Homomorphismus und des Isomorphismus von Gruppen. Eine Abbildung  $\phi$ , die jedem Element der Gruppe  $G$  eindeutig ein Element der Gruppe  $G'$  unter Wahrung der Verknüpfungsregeln

$$\phi : g \mapsto g', \quad \phi : G \rightarrow G', \quad (3.2.20a)$$

$$\phi(g_1 \circ g_2) = \phi(g_1) \circ \phi(g_2), \quad \forall g_1, g_2 \in G \quad (3.2.20b)$$

zuordnet, heißt Gruppenhomomorphismus. Die Gruppenstruktur bleibt dabei erhalten. Als wichtige Folge ergibt sich daraus, dass die Einselemente sowie die zueinander inversen Elemente von homomorphen Gruppen einander entsprechen. Erfolgt die Zuordnung der Gruppenelemente zudem in eineindeutiger Weise, d.h. ist die Abbildung  $\phi$  bijektiv, liegt ein Gruppenisomorphismus vor:  $G \cong G'$ . Zueinander isomorphe Gruppe besitzen vollkommen identische Eigenschaften und unterscheiden sich lediglich in der Bezeichnung der Elemente. Damit kann sich beim Studium einer konkreten Gruppe auf einen abstrakten Repräsentanten der Zusammenfassung aller dazu isomorphen Gruppen, die als Isomorphieklasse bezeichnet wird, beschränkt werden.

Durch Festlegung der Hintereinanderausführung zweier Bewegungen des Ortsraums als

binäre Verknüpfung<sup>9</sup> in Verbindung mit der Wirkung der Identität

$$(g_1 \circ g_2)\vec{r} = g_1(g_2\vec{r}), \quad \forall g_1, g_2 \in G, \vec{r} \in D_0, \quad (3.2.21a)$$

$$e\vec{r} = \vec{r}, \quad e \in G, \vec{r} \in D_0 \quad (3.2.21b)$$

können die eingeführten Symmetrioperationen oder Teilmengen davon unter Wahrung des Vollständigkeitsaxioms zu Gruppen erweitert werden, da sowohl die Umkehroperationen als auch das neutrale Element existieren. Gleiches ist auch möglich für die Darstellungsmatrizen der Symmetrioperatoren im euklidischen Raum mit der gewöhnlichen Matrixmultiplikation als Verknüpfung. Aus mathematischer Sicht definieren die Eigenschaften nach Gleichung (3.2.21) eine Linksoperation der Gruppe  $G$  auf dem Vektorraum  $D_0$ . Die Wirkung  $\Sigma$  dieser Gruppe ist eine Abbildung, die jedem Paar, bestehend aus einem Gruppenelement und einem Ortsvektor, ein Element des Ortsraums zuordnet:

$$\Sigma : (g, \vec{r}) \mapsto g\vec{r}, \quad \Sigma : G \times D_0 \rightarrow D_0. \quad (3.2.22)$$

Alternativ kann die Wirkung einer Symmetriegruppe auch als Rechtsoperation erklärt werden, in dieser Arbeit wird jedoch ausschließlich die Definition in Gleichung (3.2.21) zugrunde gelegt. Im Zusammenhang mit Gruppenoperationen ist der Begriff der isotropen Untergruppe bzw. Fixgruppe sowie des Orbits bzw. der Bahn eines Elements aus dem Ortsraum von großer Bedeutung. Die Untergruppe

$$G_i := \{g \in G : g\vec{r}_i = \vec{r}_i\} \quad (3.2.23)$$

der Gruppe  $G$ , deren Elemente den Ortsvektor  $\vec{r}_i$  auf sich selbst abbilden, wird als dessen Fixgruppe bezeichnet. Unter der Bahn des Vektors  $\vec{r}$  wird die Menge

$$G\vec{r} := \{g\vec{r} : g \in G\} \quad (3.2.24)$$

verstanden. Sie bildet mithin eine Partition des Ortsraumes. Zwei Elemente heißen äquivalent zueinander, wenn ihre Bahnen übereinstimmen. Das bedeutet, dass eine Symmetrioperation existiert, die die Vektoren aufeinander abbildet:

$$\vec{r}_1 \sim \vec{r}_2 \quad \Leftrightarrow \quad \exists g \in G : g\vec{r}_1 = \vec{r}_2. \quad (3.2.25)$$

Jeder Vektor ist trivialerweise zu sich selbst äquivalent.

Eine Gruppe zulässiger Symmetrioperationen eines Systems wird als dessen Symmetriegruppe bezeichnet. Enthält diese Gruppe die höchstmögliche Anzahl von Symmetrioperationen, gegenüber denen das System invariant ist, so heißt sie volle Symmetriegruppe des Systems [13]. Symmetriegruppen örtlich beschränkter, geometrischer Objekte sind stets Untergruppen der euklidischen Bewegungsgruppe, die durch die Gesamtheit aller Isometrien des euklidischen Raums gebildet wird. Ein Beispiel für unterschiedliche, aber zueinander isomorphe Symmetriegruppen ist in Abbildung 3.4 gezeigt. Das Objekt in Abbildung 3.4a) weist eine Spiegelsymmetrie auf, das Objekt in Abbildung 3.4b) ist dagegen invariant gegenüber der Drehung um den halben Vollwinkel. Die vollen Symmetriegruppen beider Objekte sind von zweiter Ordnung und besitzen dieselbe mathematische Struktur, womit sie durch die abstrakte zyklische Gruppe  $Z_2 = \langle g \rangle$  mit  $g^2 = e$  gemäß Abbildung 3.4c) repräsentiert werden können.

<sup>9</sup>Auf die besondere Kennzeichnung der Verknüpfung von zwei Symmetrioperationen wird im weiteren Verlauf verzichtet.

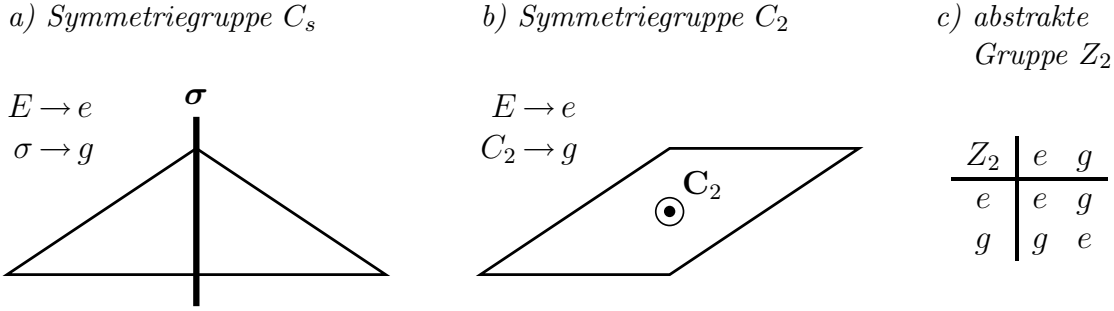


Abbildung 3.4: Planare geometrische Figuren mit unterschiedlichen Symmetriegruppen gleicher Isomorphieklasse. Die Struktur a) ist spiegelsymmetrisch und besitzt die Symmetrie der Gruppe  $C_s$ , Struktur b) ist rotationssymmetrisch und besitzt die Symmetrie der Gruppe  $C_2$ . Beide Gruppen gehören derselben Isomorphieklasse an, die durch die abstrakte Gruppe  $Z_2$  mit der Gruppentafel c) repräsentiert wird.

### 3.2.2.2 Darstellung von Gruppen

Eine Darstellung einer Gruppe ist allgemein ein Homomorphismus  $\phi$  einer abstrakten Gruppe  $G$  auf die Gruppe linearer, regulärer Operatoren  $\phi(g)$ , die einen Vektorraum  $\mathcal{V}$  auf sich selbst abbilden. Dieser bezüglich der Gruppe  $G$  invariante Vektorraum  $\mathcal{V}$  heißt Darstellungsraum der Gruppe  $G$ , wobei auch unendlich-dimensionale Räume zugelassen sind [62]. Ist die Abbildung  $\phi$  bijektiv und damit eineindeutig, wird von einer treuen Darstellung gesprochen. Da auf diskreten Vektorräumen wirkende lineare Operatoren bezüglich einer beliebig wählbaren Basis in Form von Matrizen darstellbar sind, wird sich häufig auf die Gruppe dieser Matrizen beschränkt und der Begriff der Darstellung auf diesen Spezialfall, der hier als Matrixdarstellung bezeichnet werden soll, reduziert. Für eine anschauliche Herangehensweise ist das von Vorteil und soll vorerst in dieser Weise erfolgen, für eine universelle Formulierung der harmonischen Analyse auf Gruppen wird später die allgemeinere Sichtweise bevorzugt. Die Dimension einer Darstellung  $d_\phi = \dim(\mathcal{V})$  ist gleichbedeutend mit der Dimension des Darstellungsraums und entspricht somit dem Rang der Darstellungsmatrizen der linearen Operatoren.

Wie bereits festgestellt wurde, bildet die Gesamtheit der Darstellungsmatrizen  $\mathbf{D}(g)$  der auf dem Ortsraum wirkenden Symmetrieeoperatoren mit der gewöhnlichen Matrixmultiplikation als Verknüpfung selbst auch eine Gruppe. Bei gegebenem Transformationsverhalten der Einheitsvektoren kann sehr einfach nachgewiesen werden, dass die Gruppenstruktur durch die Koordinatenabbildung in Gleichung (3.2.6) erhalten bleibt und somit die Bedingung

$$\mathbf{D}(g_1 g_2) = \mathbf{D}(g_1) \mathbf{D}(g_2) \quad (3.2.26)$$

erfüllt ist. Wegen der Isomorphie zwischen dem Ortsraum  $D_0$  und dem euklidischen Vektorraum  $\mathbb{R}^3$  handelt es sich bei  $\mathbf{D}$  um eine treue Darstellung der Symmetriegruppe  $G$ .

Ebenfalls leicht nachprüfbar ist die Wahrung der Verknüpfungsregeln bei der Abbildung in die Gruppe der Symmetrieeoperatoren auf Funktionenräumen  $T(G)$  gemäß Gleichung (3.2.16)

$$T(g_1 g_2) = T(g_1) T(g_2), \quad (3.2.27)$$

wenn als Verkettung die Hintereinanderausführung dieser Transformationen definiert wird. Dies lässt sich einfach auf Grundlage ihrer expliziten Realisierungen in Verbindung mit der Matrizenrechnung und der Rechenregel für Determinanten  $\det(\mathbf{AB}) = \det(\mathbf{A}) \det(\mathbf{B})$  zeigen. Da die Determinante eine konkrete Realisierung der Vorzeichenfunktion  $\text{sgn}$  ist, muss diese Abbildung der Gruppe  $G$  auf die zweielementige Gruppe  $\{1, -1\}$  mit der gewöhnlichen Multiplikation als Verkettung ebenfalls strukturerhaltend sein:

$$\text{sgn}(g_1 g_2) = \text{sgn}(g_1) \text{sgn}(g_2). \quad (3.2.28)$$

Folglich implizieren die Definitionsgleichungen (3.2.11) und (3.2.14) einen Gruppenhomomorphismus zwischen der Symmetriegruppe  $G$  und der Operatorgruppe  $T$ .

Durch Wechsel der Vektorraumbasis gelangt man zu unterschiedlichen, aber vollkommen gleichwertigen Darstellungsmatrizen eines linearen Operators. Dementsprechend sind Darstellungen, die simultan mittels einer Ähnlichkeitstransformation ineinander übergeführt werden können, zueinander äquivalent. Sämtliche Darstellungen einer Gruppe zerfallen somit in Klassen von paarweise zueinander äquivalenten Darstellungen. In diesem Zusammenhang ist der Charakter einer endlichdimensionalen Darstellung, der als Spur der Darstellungsmatrix definiert

$$\chi(g) := \text{tr} \{ \mathbf{T}(g) \} \quad (3.2.29)$$

und invariant unter Ähnlichkeitstransformationen ist, von besonderem Interesse. Äquivalente Darstellungen besitzen demzufolge identische Charaktere und können so leicht erkannt werden. Ebenso stimmen die Charaktere von Elementen aus einer Konjugationsklasse überein.

Entscheidend für die Ausnutzung von Symmetrien ist die Zerlegbarkeit des betrachteten Vektorraums in mehrere Untervektorräume, die durch alle Symmetrieeoperationen der Gruppe auf sich selbst abgebildet werden und damit invariant bezüglich der Symmetriegruppe sind. Das ist gleichbedeutend mit einer simultanen Überführung sämtlicher Darstellungsmatrizen in eine gleichartige Blockdiagonalform. Wenn es eine Basistransformation gibt, die diese Blockdiagonalisierung ermöglicht, dann heißt die Darstellung reduzibel. Die einzelnen, auf der Hauptdiagonalen angeordneten Blockmatrizen, die die Wirkung des linearen Operators in den korrespondierenden invarianten Unterräumen beschreiben, bilden selbst auch eine Darstellung der Gruppe und können, falls möglich, weiter ausreduziert werden. Lassen sich sämtliche Blöcke der Darstellungsmatrizen nicht mehr durch Darstellungen niedrigerer Dimension ausdrücken, ist die vollständige Reduktion der Darstellung  $\mathbf{T}(g)$  erreicht. Jede Darstellung einer Gruppe ist somit äquivalent zu einer, die sich in Form einer direkten Summe irreduzibler Darstellungen  $\mathbf{R}_k(g) : \mathcal{E}_k^i \rightarrow \mathcal{E}_k^i$  schreiben lässt. Damit zerfällt der Vektorraum  $\mathcal{V}$  in zueinander komplementäre, invariante Untervektorräume  $\mathcal{E}_k^i$ , die demnach irreduzible Darstellungsräume der Dimension  $\dim\{\mathcal{E}_k^i\} = d_k$  sind:

$$\mathbf{T}(g) \sim \mathbf{U} \mathbf{T}(g) \mathbf{U}^{-1} = \sum_{\oplus k} m_k \mathbf{R}_k(g) \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{V} = \bigoplus_{k=1}^K \bigoplus_{i=1}^{m_k} \mathcal{E}_k^i, \quad m_k \in \mathbb{N}_0. \quad (3.2.30)$$

Abhängig von der Dimension des Darstellungsraums können bestimmte irreduzible Darstellungen in der Zerlegung mehrfach oder sogar überhaupt nicht auftreten, was durch die

Multiplizität

$$m_k = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi(g) \chi_k(g^{-1}) \quad (3.2.31)$$

zum Ausdruck gebracht wird. Zueinander ähnliche Darstellungen werden dabei nicht unterschieden.

Am Beispiel des zweidimensionalen Funktionenraums<sup>10</sup>  $\mathcal{V}(\mathbb{R}, \mathbb{R}) = \text{span}\{\exp, \exp^{-1}\}$ , der offensichtlich invariant gegenüber der Spiegelsymmetriegruppe  $C_s = \{E, \sigma\}$  ist, soll der geschilderte Sachverhalt verdeutlicht werden. Der Träger der Funktionen ist auf den eindimensionalen euklidischen Raum beschränkt, so dass die Symmetrietransformationen des Ortsraums durch die  $(1 \times 1)$ -Matrizen  $\mathbf{D}(E) = (1)$  und  $\mathbf{D}(\sigma) = (-1)$  repräsentiert werden. Hieraus lässt sich auch sofort schlussfolgern, dass der Einheitsoperator und die Spiegelung die einzig möglichen zulässigen Symmetrietransformationen eindimensionaler Gebiete sein können. Die Elemente  $f \in \mathcal{V}$  sollen sich wie Skalare transformieren, so dass für die Einheitsvektoren folgt:

$$\begin{aligned} T(E) \exp &= \exp, & T(\sigma) \exp &= \exp^{-1}, \\ T(E) \exp^{-1} &= \exp^{-1}, & T(\sigma) \exp^{-1} &= \exp. \end{aligned}$$

Als Darstellung bezüglich dieser Basis resultieren damit die beiden  $(2 \times 2)$ -Matrizen

$$\mathbf{T}(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}(\sigma) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.2.32)$$

die durch eine unitäre Ähnlichkeitstransformation mit

$$\mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.2.33)$$

in eine gleichartige Blockdiagonalform

$$\mathbf{U} \mathbf{T}(E) \mathbf{U}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = (1) \oplus (1) = \mathbf{R}_1(E) \oplus \mathbf{R}_2(E), \quad (3.2.34a)$$

$$\mathbf{U} \mathbf{T}(\sigma) \mathbf{U}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = (1) \oplus (-1) = \mathbf{R}_1(\sigma) \oplus \mathbf{R}_2(\sigma) \quad (3.2.34b)$$

überführt werden können. Die so erhaltene Gruppe von Matrizen ist eine Darstellung der Gruppe  $C_s$  bezüglich der symmetriegerechten Basis  $\{\cosh, \sinh\}$ . Jede der hyperbolischen Funktionen, die ein bekanntes Beispiel für die Zerlegung von Funktionen in gerade und ungerade Anteile sind, spannt somit einen eindimensionalen invarianten Unterraum auf. Da die Gruppe  $C_s$  in zwei Konjugationsklassen zerfällt, existieren zwei inäquivalente, irreduzible Darstellungen. Das ist zum einen die triviale Einsdarstellung  $\mathbf{R}_1 : \{E, \sigma\} \rightarrow \{(1)\}$ , die jede Symmetriegruppe besitzt, sowie die ebenfalls eindimensionale Darstellung  $\mathbf{R}_2 : \{E, \sigma\} \rightarrow \{(1), (-1)\}$ .

Da die irreduziblen Darstellungen eine Basis jedes erdenklichen Darstellungsraums einer Gruppe bilden, können sie als Grundbausteine aller Matrixdarstellungen angesehen werden, so dass sich auf deren Studie beschränkt werden kann. Nach dem ersten Satz von

<sup>10</sup>Die Funktion  $\exp^{-1}$  symbolisiert die reziproke Funktion, nicht die Inverse:  $\exp^{-1}(x) := \exp(-x)$ .

BURNSIDE<sup>11</sup> ist die maximale Anzahl derartiger Darstellungen einer jeden Gruppe gleich der Anzahl ihrer Konjugationsklassen  $K$ . Folgerichtig gibt es zu finiten Gruppen auch nur eine endliche Anzahl inäquivalenter irreduzibler Darstellungen, die für alle gängigen Punktgruppen in der einschlägigen Literatur zu finden sind. Für die in dieser Arbeit relevanten Symmetriegruppen sind sie zudem im Anhang aufgelistet. Der zweite Satz von BURNSIDE liefert einen wichtigen Zusammenhang zwischen deren Dimension und der Gruppenordnung:

$$\sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} d_{\mathbf{R}}^2 = |G|. \quad (3.2.35)$$

Hierbei ist über den vollständigen Satz  $\mathcal{R} = \{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_K\}$  der inäquivalenten, irreduziblen Darstellungen zu summieren. Von zentraler Bedeutung in der Darstellungstheorie und damit für die Anwendung der Gruppentheorie zur Ausnutzung von Symmetrien ist das aus den beiden Lemmata von SCHUR<sup>12</sup> ableitbare *große Orthogonalitätstheorem*

$$d_{\mathbf{R}_m} \sum_{g \in G} [\mathbf{R}_m(g)]_{ij} [\mathbf{R}_n(g^{-1})]_{kl} = |G| \delta_{mn} \delta_{il} \delta_{jk}, \quad (3.2.36)$$

wobei  $[\mathbf{R}_m(g)]_{ij}$  und  $[\mathbf{R}_n(g^{-1})]_{kl}$  die Matrixkomponenten von zwei beliebigen irreduziblen Darstellungen sind. Eine weitere wichtige Konsequenz ist die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} d_{\mathbf{R}} \text{tr} \{ \mathbf{R}(g_{\mu}) \mathbf{R}(g_{\nu}^{-1}) \} = |G| \delta_{\mu\nu}. \quad (3.2.37)$$

Aus den beiden letzten Gleichungen wird deutlich, dass die aus den Komponenten der irreduziblen Darstellungsmatrizen gebildeten Vektoren  $\sqrt{\frac{d_{\mathbf{R}}}{|G|}} [\mathbf{R}(g)]_{ij}$  eine vollständige Orthonormalbasis des Raums  $\mathbb{C}^{|G|}$  bezüglich des Standardskalarprodukts bilden, wenn die Darstellungsmatrizen unitär gewählt werden:

$$\mathbf{R}(g^{-1}) = \mathbf{R}(g)^H \Leftrightarrow [\mathbf{R}(g^{-1})]_{ij} = [\mathbf{R}(g)]_{ji}^*. \quad (3.2.38)$$

Da jede Klasse äquivalenter Darstellungen einer finiten Gruppe mindestens eine unitäre Darstellung enthält, soll sich im weiteren Verlauf ausschließlich darauf beschränkt werden. Ein Beweis zu dieser Annahme wird beispielsweise in [70] geführt.

### 3.2.3 Gruppenalgebra

Das eigentliche mathematische Instrument zur Ausnutzung geometrischer Symmetrien in der numerischen Feldberechnung stützt sich auf eine Erweiterung von Gruppen zu Algebren, die dadurch motiviert ist, dass neben der Hintereinanderausführung von Symmetrioperationen auch deren Linearkombinationen sinnvoll definiert und angewendet werden können, so dass ein breiteres Spektrum an Operatoren verfügbar ist.

Zur Konstruktion einer Gruppenalgebra über den komplexen Zahlen  $\mathbb{C}(G)$  wird ein Vektorraum über diesem Körper mit den vorerst abstrakten Gruppenelementen  $g$  als orthonormale Basis betrachtet, womit gleichermaßen ein Skalarprodukt<sup>13</sup>

$$\langle g_i, g_j \rangle_G := \delta_{ij} \quad (3.2.39)$$

<sup>11</sup>William Burnside, 1852–1927, englischer Mathematiker

<sup>12</sup>Issai Schur, 1875–1941, deutscher Mathematiker

<sup>13</sup>Das hier verwendete Skalarprodukt soll linear im ersten und semilinear im zweiten Argument sein.

auf diesem Raum erklärt ist. Die Menge aller linearen Funktionale, die diesen Vektorraum auf den Körper der komplexen Zahlen abbilden

$$\alpha : \mathbb{C}(G) \rightarrow \mathbb{C}, \quad \alpha \in \mathbb{C}(G)^*, \quad (3.2.40)$$

konstituieren den zugehörigen Dualraum  $\mathbb{C}(G)^*$ , dessen Basis durch  $\gamma_i(g_j) = \delta_{ij}$  festgelegt sein soll. Damit lässt sich jedes Element aus diesen beiden Räumen als Linearkombination der Basisvektoren

$$a = \sum_{i=1}^{|G|} \gamma_i(a) g_i, \quad a \in \mathbb{C}(G) \quad \text{und} \quad \alpha = \sum_{i=1}^{|G|} \alpha(g_i) \gamma_i, \quad \alpha \in \mathbb{C}(G)^* \quad (3.2.41)$$

darstellen. Eine konkrete Bedeutung erhalten die als rein formale Summe erklärten Elemente  $a$  erst, wenn an Stelle der abstrakten Gruppenelemente konkrete Realisierungen, wie beispielsweise Symmetrieeoperatoren, treten, für die eine Addition und Vervielfachung in geeigneter Weise definiert wird. Durch die Abbildung

$$\Phi : a \mapsto \alpha, \quad \Phi : \mathbb{C}(G) \rightarrow \mathbb{C}(G)^*, \quad \text{mit } \Phi(a) := \langle \cdot, a \rangle_G \quad (3.2.42)$$

werden schließlich die Elemente aus den beiden Räumen in eindeutiger Weise miteinander in Beziehung gesetzt, so dass das Element  $a$  mit dem zugehörigen Funktional  $\alpha$  identifiziert werden kann. Aus Gleichung (3.2.42) folgt in Verbindung mit dem Skalarprodukt, das unter Berücksichtigung von Gleichung (3.2.39) die Gestalt

$$\langle a_1, a_2 \rangle_G = \sum_{i=1}^{|G|} \gamma_i(a_1) \gamma_i(a_2)^* \quad (3.2.43)$$

annimmt, dass die Koeffizienten korrespondierender Elemente konjugiert komplex zueinander sind

$$\alpha(g_i) = \gamma_i(a)^*. \quad (3.2.44)$$

Die Addition von Vektoren erfolgt wie gewohnt komponentenweise. Ebenso ist die skalare Multiplikation mit einem Element des Körpers  $c \in \mathbb{C}$  durch die Wirkung auf die einzelnen Komponenten erklärt. Damit gilt:

$$a_1 + a_2 = \sum_{i=1}^{|G|} [\gamma_i(a_1) + \gamma_i(a_2)] g_i \quad \Leftrightarrow \quad (\alpha_1 + \alpha_2)(g) = \alpha_1(g) + \alpha_2(g), \quad (3.2.45a)$$

$$c a = \sum_{i=1}^{|G|} [c \gamma_i(a)] g_i \quad \Leftrightarrow \quad (c\alpha)(g) = c\alpha(g). \quad (3.2.45b)$$

Durch Definition einer weiteren binären Verknüpfung

$$a_1 \star a_2 = \sum_{i=1}^{|G|} \sum_{j=1}^{|G|} \gamma_i(a_1) \gamma_j(a_2) g_i \circ g_j, \quad (3.2.46)$$

die durch die Gruppenmultiplikation als Verknüpfungsvorschrift für die Basiselemente in Verbindung mit dem Distributivgesetz auf natürliche Weise herbeigeführt wird, kann der



Vektorraum zu einer Algebra mit dem neutralen Gruppenelement  $e$  als Einselement dieser Operation, dem das Funktional  $\delta$  mit der Eigenschaft

$$\delta(g) := \begin{cases} 1, & g = e \\ 0, & g \neq e \end{cases} \quad (3.2.47)$$

zugeordnet ist, ergänzt werden. Im zugehörigen Dualraum entspricht diese Verknüpfung einer diskreten Faltung, die auch als Faltung auf finiten Gruppen bezeichnet wird. Die Koeffizienten des Faltungsproduktes bezüglich der aus den Gruppenelementen bestehenden Basis ergeben sich unter Ausnutzung des Umordnungstheorems zu:

$$(\alpha_1 \star \alpha_2)(g) = \sum_{j=1}^{|G|} \alpha_1(g_j) \alpha_2(g_j^{-1}g) = \sum_{j=1}^{|G|} \alpha_1(gg_j^{-1}) \alpha_2(g_j). \quad (3.2.48)$$

Es ist zu beachten, dass diese assoziative bilineare Abbildung im Allgemeinen nicht kommutativ ist. Lediglich im Fall abelscher Gruppe trifft dies uneingeschränkt zu.

Zur späteren Feststellung und Ausnutzung bestimmter Eigenschaften der Symmetrieeoperatoren und deren Linearkombinationen erweist sich die Einführung des adjungierten Elementes  $a^*$  bezüglich des Skalarproduktes als sinnvoll, das auf Basis der Definitionsgleichung  $\langle a a_1, a_2 \rangle_G = \langle a_1, a^* a_2 \rangle_G$  die konkrete Gestalt

$$a^* = \sum_{i=1}^{|G|} \gamma_i(a)^* g_i^{-1} = \sum_{i=1}^{|G|} \alpha(g_i^{-1}) g_i \quad (3.2.49)$$

besitzt. Hierbei handelt es sich formal um eine selbstinverse Abbildung der Algebra auf sich, weshalb sie als Involution bezeichnet wird.

Werden die Koordinaten aus Gleichung (3.2.44) zu einem Spaltenvektor  $\mathbf{a} \in \mathbb{C}^{|G|}$  mit den Komponenten

$$[\mathbf{a}]_n = \alpha(g_n), \quad n \in [1, |G|] \quad (3.2.50)$$

zusammengefasst, lassen sich die bisher eingeführten Operationen und Relationen auch sehr elegant mit Hilfe des Matrizenkalküls ausdrücken. Das Faltungsprodukt der Gruppenalgebra  $\mathbb{C}(G)$  kann dabei als eine auf den Vektorraum  $\mathbb{C}^{|G|}$  wirkende lineare Abbildung, die durch eine Matrix repräsentiert wird, gedeutet werden, womit Gleichung (3.2.48) auch in der äquivalenten Form

$$\begin{pmatrix} (\alpha_1 \star \alpha_2)(g_1) \\ (\alpha_1 \star \alpha_2)(g_2) \\ \vdots \\ (\alpha_1 \star \alpha_2)(g_{|G|}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1(g_1 g_1^{-1}) & \alpha_1(g_1 g_2^{-1}) & \cdots & \alpha_1(g_1 g_{|G|}^{-1}) \\ \alpha_1(g_2 g_1^{-1}) & \alpha_1(g_2 g_2^{-1}) & \cdots & \alpha_1(g_2 g_{|G|}^{-1}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_1(g_{|G|} g_1^{-1}) & \alpha_1(g_{|G|} g_2^{-1}) & \cdots & \alpha_1(g_{|G|} g_{|G|}^{-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_2(g_1) \\ \alpha_2(g_2) \\ \vdots \\ \alpha_2(g_{|G|}) \end{pmatrix} \quad (3.2.51)$$

geschrieben werden kann. Jede Zeile bzw. Spalte der Matrix setzt sich aus den Koordinaten des ersten Faktors des Faltungsproduktes zusammen, deren Reihenfolge von der Gruppenstruktur bestimmt wird und damit einen ähnlichen Aufbau wie die Gruppentafel besitzt. Neben einem kompakten Erscheinungsbild bietet diese vollkommen gleichwertige Sichtweise den Vorteil, dass sämtliche Darstellungen und Umformungen der Gleichungen in der für eine Umsetzung auf einer Rechenanlage vorteilhaften Matrixform erfolgen kann.

Ein wichtiger Spezialfall ergibt sich, wenn die Gruppenalgebra selbst als Darstellungsraum angesehen wird, auf dem die erzeugende Gruppe  $G$ , wie vereinbart wurde, von links wirkt. Diese Gruppenaktion entspricht der eingeführten Multiplikation eines Basiselementes  $g$  mit einem beliebigen Element der Algebra  $a$  und führt auf die Gruppe der  $(|G| \times |G|)$ -Permutationsmatrizen als Repräsentanten der Symmetrieoperatoren mit den Komponenten

$$[\mathbf{D}_{\text{reg}}(g)]_{ij} = \delta(g_i^{-1}gg_j), \quad i, j \in [1, |G|], \quad (3.2.52)$$

da nach dem Umordnungstheorem lediglich die Einträge des zweiten Faktors vertauscht werden. Die Abbildung der Symmetriegruppe auf diese Matrixgruppe wird reguläre Darstellung genannt.

Aus der Systemtheorie ist bekannt, dass ein durch die FOURIER-Transformation vermittelter Basiswechsel die Auswertung von Faltungsprodukten, die bei der Bestimmung der Ausgangsreaktion linearer, zeitinvarianter Systeme auftreten, wesentlich vereinfacht und effizienter gestaltet. Dieses Vorgehen lässt sich auch ohne weitere Schwierigkeiten auf die hier betrachtete Gruppenalgebra ausweiten und führt auf eine verallgemeinerte Variante der FOURIER-Transformation. Aufgrund der besonderen Eigenschaften der unitären, irreduziblen Darstellungen bietet sich die Konstruktion eines neuen Satzes von Basiselementen der Form

$$R_k^{ij} = \sum_{g \in G} [\mathbf{R}_k(g)]_{ij} g, \quad i, j \in [1, d_{\mathbf{R}_k}], k \in [1, K], R_k^{ij} \in \mathbb{C}(G) \quad (3.2.53)$$

an, der, wie sich leicht mit Hilfe der Orthogonalitätsrelation zeigen lässt, vollständig und orthogonal bezüglich des auf dieser Algebra eingeführten Skalarproduktes ist:

$$\langle R_\mu^{ij}, R_\nu^{kl} \rangle_G = \frac{|G|}{d_{\mathbf{R}_\mu}} \delta_{\mu\nu} \delta_{ik} \delta_{jl}. \quad (3.2.54)$$

Im Gegensatz zum ursprünglichen Basissatz wurde ein dreidimensionales Indizierungsschema für die neuen Basiselemente gewählt, das sich später als sehr vorteilhaft herausstellen wird. Nach dem Satz von BURNSIDE ist die Anzahl der neuen Basiselemente erwartungsgemäß gleich der Gruppenordnung und damit der Dimension der Gruppenalgebra. Damit kann jedes Element der Gruppenalgebra in die so definierte Basis entwickelt werden:

$$a = \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^{d_{\mathbf{R}_k}} \sum_{j=1}^{d_{\mathbf{R}_k}} \frac{d_{\mathbf{R}_k}}{|G|} \alpha(R_k^{ij})^* R_k^{ij}. \quad (3.2.55)$$

Die der Basis  $R_k^{ij}$  zugeordneten Koordinaten sind über den durch Gleichung (3.2.42) vermittelten Zusammenhang zwischen Algebra und Dualraum festgelegt:

$$\alpha(R_k^{ij}) = \langle R_k^{ij}, a \rangle_G = \sum_{g \in G} \alpha(g) [\mathbf{R}_k(g)]_{ij}, \quad \alpha(R_k^{ij}) \in \mathbb{C}. \quad (3.2.56)$$

Für eine übersichtliche und kompakte Schreibweise erweist es sich als sinnvoll, die mit einer Darstellung korrespondierenden Koordinaten als Komponenten  $\alpha(R_k^{ij}) = [\alpha(\mathbf{R}_k)]_{ij}$  einer quadratischen Matrix aufzufassen, so dass Gleichung (3.2.56) die endgültige Gestalt

$$\alpha(\mathbf{R}) = \sum_{g \in G} \alpha(g) \mathbf{R}(g), \quad \alpha(\mathbf{R}) \in \mathbb{C}^{d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}}} \quad (3.2.57)$$

annimmt. Durch Einsetzen von Gleichung (3.2.53) in Gleichung (3.2.55) lassen sich die Koeffizienten bezüglich der alten Basis aus denen bezüglich der neuen Basis zurück gewinnen. Unter Berücksichtigung von Gleichung (3.2.38) kann dieser Zusammenhang auch mit Hilfe der Spur einer Matrix in der geschlossenen Form

$$\alpha(g) = \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} \frac{d_{\mathbf{R}}}{|G|} \text{tr} \{ \alpha(\mathbf{R}) \mathbf{R}(g^{-1}) \} , \quad \alpha(g) \in \mathbb{C} \quad (3.2.58)$$

angegeben werden. Der durch die Gleichungen (3.2.57) und (3.2.58) vermittelte Basiswechsel wird als verallgemeinerte FOURIER-Transformation oder auch als FOURIER-Transformation auf finiten Gruppen bezeichnet.

Für eine Darstellung dieser Basistransformation im Rahmen der Matrizenrechnung soll vereinbart werden, dass der Koeffizientenvektor  $\hat{\mathbf{a}} \in \mathbb{C}^{|G|}$  bezüglich der neuen Basis mit den Komponenten

$$[\hat{\mathbf{a}}]_m = \sqrt{\frac{d_{\mathbf{R}_k}}{|G|}} [\alpha(\mathbf{R}_k)]_{ij} \quad (3.2.59)$$

durch sequentielle Anordnung der Spalten von  $\alpha(\mathbf{R})$  aufgebaut ist, womit der Zusammenhang zwischen den beiden Indizierungsschemata durch

$$m = i + (j - 1)d_{\mathbf{R}_k} + (k - 1)Kd_{\mathbf{R}_k}, \quad i, j \in [1, d_{\mathbf{R}_k}], \quad k \in [1, K] \quad (3.2.60)$$

gegeben ist. Zusätzlich wurde eine passende Normierung vorgenommen, um zu einer unitären Transformationsmatrix  $\mathbf{F} \in \mathbb{C}^{|G| \times |G|}$  mit den Komponenten

$$[\mathbf{F}]_{mn} = \sqrt{\frac{d_{\mathbf{R}_k}}{|G|}} [\mathbf{R}_k(g_n)]_{ij}, \quad n \in [1, |G|] \quad (3.2.61)$$

zu gelangen, womit sich obige Korrespondenz auch in Matrixschreibweise

$$\hat{\mathbf{a}} = \mathbf{F} \mathbf{a} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{a} = \mathbf{F}^H \hat{\mathbf{a}} \quad (3.2.62)$$

formulieren lässt.

Der immense Vorzug des Basiswechsels wird deutlich, wenn die Auswertung des Faltungsproduktes in der neuen Basis näher in Augenschein genommen wird. Bedingt durch die leicht nachprüfbare Verknüpfungseigenschaft der neuen Basiselemente

$$R_{\mu}^{ij} R_{\nu}^{kl} = \frac{|G|}{d_{\mathbf{R}_{\mu}}} \delta_{\mu\nu} \delta_{jk} R_{\mu}^{il} \quad (3.2.63)$$

vereinfacht sich die Faltung von zwei Elementen des Dualraums zu einer komponentenweisen Multiplikation der zugehörigen Koordinatenmatrizen bezüglich der neuen Basis:

$$(\alpha_1 \star \alpha_2)(\mathbf{R}) = \alpha_1(\mathbf{R}) \alpha_2(\mathbf{R}). \quad (3.2.64)$$

Im Kontext der Matrizenrechnung wird der die Faltung beschreibende Operator durch die Matrix  $\mathbf{F}$  einer unitären Ähnlichkeitstransformation unterworfen und nimmt Blockdiagonalgestalt mit den Teilmatrizen  $\alpha_1(\mathbf{R})$ , die jeweils  $d_{\mathbf{R}}$ -fach auf der Hauptdiagonalen vertreten sind, an. Für das Beispiel der regulären Darstellungsmatrizen folgt daraus, dass

sich diese bezüglich der neuen Basis als direkte Summe aus den irreduziblen Darstellungen  $\mathbf{R}(g)$  der Gruppe  $G$  mit der Multiplizität  $d_{\mathbf{R}}$  zusammensetzen. Zur Illustration sei die Transformation der regulären Darstellungsmatrix  $\mathbf{D}_{\text{reg}}(\sigma_v)$  des Spiegelungsoperators  $\sigma_v$  aus der Gruppe  $C_{3v} = \{E, C_3, C_3^2, \sigma_v, \sigma_v C_3, C_3 \sigma_v\}$  betrachtet:

$$\mathbf{F} \mathbf{D}_{\text{reg}}(\sigma_v) \mathbf{F}^H = \mathbf{F} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{F}^H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.2.65)$$

Somit leistet die FOURIER-Transformation auf Gruppen eine simultane Blockdiagonalisierung der Darstellungsmatrizen der Symmetrieeoperatoren.

Ein interessanter Sonderfall ergibt sich, wenn die auf der abstrakten zyklischen Gruppe  $Z_n$  erklärte Algebra über den komplexen Zahlen herangezogen wird. Bedingt durch die strukturellen Eigenschaften dieser abelschen Gruppe kann eine Übereinstimmung der Gestalt des Faltungsproduktes in Gleichung (3.2.48) mit der aus der digitalen Signalverarbeitung bekannten Faltung endlicher Signalfolgen festgestellt werden. Die zugehörigen irreduziblen Darstellungen sind die  $n$ -ten Einheitswurzeln, welche gerade die Basis der wohl vertrauten diskreten FOURIER-Transformation (DFT) bilden.

Anzumerken ist, dass sich das dargelegte Konzept der Erweiterung einer Gruppe zu einer Algebra weiter verallgemeinern lässt, indem ein beliebiger Ring zugrunde gelegt wird, dessen Anforderungen an die mathematische Struktur deutlich schwächer sind als die des hier angenommenen Zahlkörpers. Damit lassen sich wesentlich abstraktere Algebren definieren, wovon auch in den späteren Kapiteln Gebrauch gemacht wird.

## 3.3 Zerlegung in Symmetrietypen

### 3.3.1 Spektralanalyse der Symmetrieeoperatoren

Ziel dieses Abschnittes ist es, den Ursprung und die Bedeutung der irreduziblen Darstellungen einer Symmetriegruppe, die sich aus Sicht der Spektraltheorie als Eigenwerte der zugehörigen Symmetrieeoperatoren interpretieren lassen, darzulegen, um so einen tieferen Einblick in die grundlegende Idee der Symmetriereduktion zu gewinnen. Die Spektralanalyse eines linearen Operators oder genauer eines Endomorphismus führt typischerweise auf ein Eigenwertproblem, dessen Lösung Aufschluss über seine Eigenräume gibt, so dass unter bestimmten Voraussetzungen die vollständige Diagonalisierung des Operators erreichbar ist. Im Zusammenhang mit Symmetriegruppen sind nicht die im Allgemeinen voneinander verschiedenen Eigensysteme der einzelnen Symmetrieeoperatoren, sondern eine simultane Eigenbasis der gesamten Operatorgruppe von Interesse<sup>14</sup>.

<sup>14</sup>In Analogie zur Definition des zu einem bestimmten Eigenwert gehörenden Eigenraums eines einzelnen Operators soll unter einem *simultanen Eigenraum* einer Operatorgruppe ein Untervektorraum verstanden werden, der invariant unter allen Symmetrietransformationen dieser Gruppe zu einem bestimmten Satz von Eigenwerten ist. Wegen der geforderten Invarianzeigenschaft ist er auch zugleich Darstellungsraum, der im Allgemeinen weiter in irreduzible Darstellungsräume gleichen Typs zerlegbar ist.

Zur Demonstration der Spektralzerlegung der Symmetrieeoperatoren wird exemplarisch von einer Symmetriegruppe  $G$  ausgegangen, die selbst auf dem durch ihre Elemente aufgespannten Vektorraum über den komplexen Zahlen operiert, wobei deren Wirkung durch die Gruppenmultiplikation induziert wird. Die Operatoren  $g \in G$  sind damit sowohl Automorphismen als auch Basisvektoren dieses regulären Darstellungsraums, dessen Dimension gleich der Gruppenordnung  $|G|$  ist. Aus der Eigenwertgleichung des Symmetrieeoperators

$$ge_k^{(i)}(g) = \lambda_k(g)e_k^{(i)}(g) \quad (3.3.1)$$

lässt sich leicht durch  $p$ -malige Anwendung dieses Operators die Säkulargleichung

$$[\lambda_k(g)^p - 1]^{\frac{|G|}{p}} = 0 \quad (3.3.2)$$

ableiten, die von den  $p$ -ten Einheitswurzeln

$$\lambda_k(g) = \zeta_p^k = \exp\left(j\frac{2\pi}{p}\right)^k, \quad k \in [1, p] \quad (3.3.3)$$

befriedigt wird. Hierin kennzeichnet  $p$  die Periode des Gruppenelementes  $g$ . Aus der Lösung (3.3.3) folgt, dass sich alle gesuchten Spektralwerte  $\lambda_k(g)$  auf dem Einheitskreis in der komplexen Ebene befinden:  $|\lambda_k(g)| = 1$ . Damit sind alle Symmetrieeoperatoren unitär, was auch unmittelbar aus Gleichung (3.2.49) mit  $\gamma_i(g_j) = \delta_{ij}$  folgt. Der Eigenraum zu jedem dieser paarweise verschiedenen Eigenwerte

$$\mathcal{V}_k(g) = \text{span} \left\{ e_k^{(i)} : i \in \left[1, \frac{|G|}{p}\right] \right\} \quad (3.3.4)$$

wird von einem Satz linear unabhängiger Eigenvektoren  $e_k^{(i)}(g)$  aufgespannt und besitzt eine von der Vielfachheit des Eigenwertes abhängige Dimension  $|G|/p$ . Da ein unitärer Operator zugleich normal ist, kann dieser unter Verweis auf den Spektralsatz als Linearkombination von paarweise zueinander orthogonalen Projektionsoperatoren

$$P_k(g) = \frac{1}{p} \sum_{\mu=1}^p [\lambda_k(g)^* g]^\mu, \quad (3.3.5)$$

die auf den zum Eigenwert  $\lambda_k(g)$  gehörenden Eigenraum  $\mathcal{V}_k(g)$  abbilden und selbst auch der Eigenwertgleichung genügen, ausgedrückt werden:

$$g = \sum_{k=1}^p \lambda_k(g) P_k(g). \quad (3.3.6)$$

Die Projektoren bilden dabei eine Zerlegung der Eins:

$$\sum_{k=1}^p P_k(g) = e. \quad (3.3.7)$$

Folglich kann jeder Symmetrieeoperator für sich vollständig diagonalisiert werden. Die konkrete Bestimmung gemeinsamer invarianter Untervektorräume soll zuerst anhand der zyklischen Gruppe als Vertreter abelscher Gruppen vorgenommen und anschließend auf eine speziell gewählte nichtkommutative Gruppe erweitert werden.

### 3.3.1.1 Abelsche Gruppen

Aus der Spektraltheorie ist bekannt, dass zwei Operatoren mit identischer Eigenbasis kommutieren. Der Umkehrschluss ist zulässig, so dass die simultane Diagonalisierung der Operatoren einer abelschen Gruppe, deren Elemente definitionsgemäß paarweise kommutieren, von vornherein sichergestellt und einfach auf Grundlage einer Eigenwertanalyse der einzelnen Operatoren durchführbar ist.

Gegenstand der folgenden Untersuchung ist die diskrete Drehgruppe  $C_n = \langle C_n \rangle$ , die von der Drehung um den Winkel  $2\pi/n$  erzeugt wird und deren Gruppenordnung  $|G| = n$  ist. Die Periode des Gruppenelementes  $C_n^\nu$  lässt sich beispielsweise aus dem kleinsten gemeinsamen Vielfachen von Gruppenordnung und Exponenten bestimmen:  $\nu p_\nu = \text{kgV}(n, \nu)$ . Zum Zweck einer einfacheren und übersichtlicheren Formulierung der nachfolgenden Zusammenhänge wird im Gegensatz zu Gleichung (3.3.3) eine andere Zuordnung zwischen den Zählindizes  $k$  und den Eigenwerten eines jeden Drehoperators gewählt:

$$\lambda_k(C_n^\nu) = \exp\left(j \frac{2\pi}{n} \nu k\right), \quad P_k(C_n^\nu) = \frac{1}{p_\nu} \sum_{\mu=1}^{p_\nu} [\lambda_k(C_n^\nu)^* C_n^\nu]^\mu, \quad k \in [1, p_\nu]. \quad (3.3.8)$$

Aus Gleichung (3.3.8) kann geschlossen werden, dass die zu Elementen gleicher Periode gehörenden Projektoren übereinstimmen, womit sie auf identische Eigenräume, jedoch zu unterschiedlichen Eigenwerten abbilden. Des Weiteren kann jeder Projektionsoperator weiter in die eindimensionalen Projektoren des erzeugenden Elementes

$$P_k = \frac{1}{n} \sum_{\mu=1}^n \lambda_k(C_n^\mu)^* C_n^\mu, \quad k \in [1, n] \quad (3.3.9)$$

aufgespalten werden:

$$P_k(C_n^\nu) = \sum_{\kappa=0}^{\frac{n}{p_\nu}-1} P_{\kappa p_\nu + k}, \quad k \in [1, p_\nu]. \quad (3.3.10)$$

Diese Operatoren projizieren auf eindimensionale, bezüglich sämtlicher Symmetrieeoperatoren invariante Untervektorräume und konstituieren, da sie zugleich auch Elemente des Darstellungsraumes sind, eine Basis des Eigensystems der Operatorgruppe

$$\mathcal{E}_k(C_n) = \text{span} \{P_k\}, \quad k \in [1, n]. \quad (3.3.11)$$

Die Menge aller Operatoreigenwerte  $\lambda_k(C_n^\nu)$  entsprechen unter Einbeziehung ihrer Vielfachheit dem vollständigen Satz inäquivalenter, irreduzibler Darstellungen  $\mathbf{R}_k(C_n^\nu)$  der diskreten Drehgruppe  $C_n$ . Dass abelsche Gruppen generell nur eindimensionale, irreduzible Darstellungen besitzen, ist unter anderem eine unmittelbare Konsequenz aus der Vertauschbarkeit aller Elemente, die, wie bereits erwähnt wurde, eine Diagonalisierbarkeit der Operatorgruppe und damit die Existenz einer simultanen eindimensionalen Eigenbasis garantiert.

### 3.3.1.2 Nichtkommutative Gruppen

Bedingt durch die fehlende Voraussetzung der Vertauschbarkeit der Elemente nichtkommutativer Gruppen ist eine simultane Diagonalisierung der Operatoren wie bei abelschen

Gruppen nicht mehr gegeben. Es ist zwar auch in diesem Fall möglich, gemeinsame invariante Untervektorräume zu finden, diese sind jedoch im Allgemeinen nicht eindimensional und lassen sich auch nicht weiter reduzieren. Am Beispiel der Gruppe  $C_{3v} = \langle C_3, \sigma_v \rangle$ , die durch die Drehung um den Winkel  $2\pi/3$  und der Spiegelung an der die Drehachse enthaltenen Ebene erzeugt wird, soll auf die Besonderheiten, die die nichtkommutative harmonische Analyse mit sich bringt, näher eingegangen werden.

Für die eigentlichen Drehungen  $C_3$  und  $C_3^2$  ergeben sich unter Verweis auf die Ergebnisse des vorherigen Unterabschnittes die Eigenwerte und Projektoren auf die zugehörigen zweidimensionalen Eigenräume mit der dritten Einheitswurzel  $\zeta_3 = \exp(j2\pi/3)$  zu:

$$\lambda_k(C_3^\nu) = \zeta_3^{k\nu}, \quad P_k(C_3^\nu) = \frac{1}{3} \sum_{\mu=1}^3 [\zeta_3^{-k\nu} C_3^\mu]^\mu, \quad \nu \in [1, 2], \quad k \in [1, 3]. \quad (3.3.12)$$

Die Spiegelungen  $\sigma_v$ ,  $\sigma'_v = C_3\sigma_v$  und  $\sigma''_v = \sigma_v C_3$  besitzen jeweils zwei Eigenwerte mit der Vielfachheit Drei, so dass der 6-dimensionale Darstellungsraum in zwei dreidimensionale Eigenräume zerfällt:

$$\lambda_{1/2}(\sigma_v) = \pm 1, \quad P_{1/2}(\sigma_v) = \frac{1}{2} (E \pm \sigma_v), \quad (3.3.13a)$$

$$\lambda_{1/2}(\sigma'_v) = \pm 1, \quad P_{1/2}(\sigma'_v) = \frac{1}{2} (E \pm \sigma'_v), \quad (3.3.13b)$$

$$\lambda_{1/2}(\sigma''_v) = \pm 1, \quad P_{1/2}(\sigma''_v) = \frac{1}{2} (E \pm \sigma''_v). \quad (3.3.13c)$$

Mit der Identität  $E$ , zu der erwartungsgemäß nur ein einziger Eigenwert gehört

$$\lambda_1(E) = 1, \quad P_1(E) = E, \quad (3.3.14)$$

ist die Spektralzerlegung der einzelnen Operatoren abgeschlossen. Zur Bestimmung der Eigenvektoren wird von einem symmetrieangepassten Basissatz für den Darstellungsraum mit den Eigenwerten als Gewichte

$$P_1^{11} = \frac{1}{6} (E + C_3 + C_3^2 + \sigma_v + \sigma'_v + \sigma''_v), \quad (3.3.15a)$$

$$P_2^{11} = \frac{1}{6} (E + C_3 + C_3^2 - \sigma_v - \sigma'_v - \sigma''_v), \quad (3.3.15b)$$

$$P_3^{11} = \frac{1}{3} (E + \zeta_3^2 C_3 + \zeta_3 C_3^2), \quad (3.3.15c)$$

$$P_3^{12} = \frac{1}{3} (\sigma_v + \zeta_3^2 \sigma'_v + \zeta_3 \sigma''_v), \quad (3.3.15d)$$

$$P_3^{21} = \frac{1}{3} (\sigma_v + \zeta_3 \sigma'_v + \zeta_3^2 \sigma''_v), \quad (3.3.15e)$$

$$P_3^{22} = \frac{1}{3} (E + \zeta_3 C_3 + \zeta_3^2 C_3^2) \quad (3.3.15f)$$

ausgegangen, der bezüglich des Skalarproduktes gemäß Gleichung (3.2.39) ebenso wie der ursprüngliche Basissatz vollständig und orthonormal ist. Ein Vergleich mit Gleichung (3.2.53) zeigt unter Verweis auf den im Anhang B.3 angegebenen Satz der irreduziblen Darstellungen der  $C_{3v}$ -Gruppe, dass die so konstruierten Basisvektoren bis auf einen Normierungsfaktor mit denen für die verallgemeinerte FOURIER-Transformation übereinstimmen. Die Operatoreigenwerte können demzufolge mit den Komponenten der irreduziblen Darstellungsmatrizen identifiziert werden. Nach Feststellung ihrer Transformationseigenschaften lassen sich die Eigenvektoren bezüglich der neuen Basis bestimmen und die gewünschten Eigenräume der einzelnen Operatoren

$$\mathcal{V}_1(E) = \text{span} \{ P_1^{11}, P_2^{11}, P_3^{11}, P_3^{12}, P_3^{21}, P_3^{22} \}, \quad (3.3.16a)$$

$$\mathcal{V}_1(C_n) = \mathcal{V}_1(C_n^2) = \text{span} \{P_3^{11}, P_3^{12}\}, \quad (3.3.16b)$$

$$\mathcal{V}_2(C_n) = \mathcal{V}_2(C_n^2) = \text{span} \{P_3^{21}, P_3^{22}\}, \quad (3.3.16c)$$

$$\mathcal{V}_3(C_n) = \mathcal{V}_3(C_n^2) = \text{span} \{P_1^{11}, P_2^{11}\}, \quad (3.3.16d)$$

$$\mathcal{V}_{1/2}(\sigma_v) = \text{span} \left\{ \frac{1}{2} (P_3^{11} \pm P_3^{21}), \frac{1}{2} (P_3^{12} \pm P_3^{22}), P_{1/2} \right\}, \quad (3.3.16e)$$

$$\mathcal{V}_{1/2}(\sigma'_v) = \text{span} \left\{ \frac{1}{2} (\zeta_3^2 P_3^{11} \pm \zeta_3 P_3^{21}), \frac{1}{2} (\zeta_3^2 P_3^{12} \pm \zeta_3 P_3^{22}), P_{1/2} \right\}, \quad (3.3.16f)$$

$$\mathcal{V}_{1/2}(\sigma''_v) = \text{span} \left\{ \frac{1}{2} (\zeta_3 P_3^{11} \pm \zeta_3^2 P_3^{21}), \frac{1}{2} (\zeta_3 P_3^{12} \pm \zeta_3^2 P_3^{22}), P_{1/2} \right\} \quad (3.3.16g)$$

angeben. Alle Eigenräume der betrachteten Operatoren sind zwar mehrdimensional und damit entartet, können aber weiter zerlegt werden, da jeder Eigenvektor selbst einen eindimensionalen Eigenraum zum gleichen Eigenwert aufspannt. Gesucht sind jedoch kleinstmögliche Untervektorräume, die invariant bezüglich sämtlicher Symmetrieeoperatoren sind. Die Vektoren  $P_1^{11}$  und  $P_2^{22}$  treten isoliert in allen Eigenräumen auf, womit offensichtlich jeder eine eigenständige Basis eines eindimensionalen simultanen Eigenraums konstituiert. Die verbleibenden Vektoren  $P_3^{11}$ ,  $P_3^{12}$ ,  $P_3^{21}$  und  $P_3^{22}$  spannen ebenfalls einen invarianten Untervektorraum auf, der weiter in irreduzible Bestandteile zerlegbar ist. So bilden beispielsweise wegen

$$\begin{aligned} C_3 P_3^{11} &= \zeta_3 P_3^{11}, & \sigma_v P_3^{11} &= P_3^{21}, \\ C_3 P_3^{21} &= \zeta_3^2 P_3^{21}, & \sigma_v P_3^{21} &= P_3^{11} \end{aligned}$$

die beiden Vektoren  $P_3^{11}$  und  $P_3^{21}$  eine mögliche Basis eines zweidimensionalen Untervektorraums, der invariant bezüglich aller Operatoren ist. Zu den beiden bereits ermittelten eindimensionalen simultanen Eigenräumen der Operatorgruppe  $C_{3v}$  schließen sich letztendlich noch zwei zweidimensionale Eigenräume gleichen Typs an

$$\mathcal{E}_1(C_{3v}) = \text{span} \{P_1^{11}\}, \quad (3.3.17a)$$

$$\mathcal{E}_2(C_{3v}) = \text{span} \{P_2^{11}\}, \quad (3.3.17b)$$

$$\mathcal{E}_3^1(C_{3v}) = \text{span} \{P_3^{11}, P_3^{21}\}, \quad (3.3.17c)$$

$$\mathcal{E}_3^2(C_{3v}) = \text{span} \{P_3^{12}, P_3^{22}\}, \quad (3.3.17d)$$

die nicht weiter in invariante Untervektorräume niedrigerer Dimension zerlegbar sind. Sie repräsentieren demnach irreduzible Darstellungsräume, da die beiden Basisvektoren der Eigenräume  $\mathcal{E}_3^1$  bzw.  $\mathcal{E}_3^2$  durch die Spiegelungsoperationen ineinander transformiert werden. Das bedeutet, dass die Operatoren dieser Gruppe lediglich in eine gleichartige Blockdiagonalform überführt werden können, auch wenn die einzelnen Operatoren für sich betrachtet vollständig diagonalisierbar sind. Wie bereits im vorangegangenen Abschnitt angedeutet wurde, entspricht die Vielfachheit, mit der ein irreduzibler Darstellungsraum eines bestimmten Typs auftritt, im regulären Fall genau dessen Dimension  $m_{\mathbf{R}} = d_{\mathbf{R}}$ . Leicht nachprüfbar ist, dass  $P_1^{11}$  und  $P_2^{11}$  Projektoren auf die simultanen Eigenräume  $\mathcal{E}_1$  und  $\mathcal{E}_2$  sind. Dahingegen projizieren die Operatoren  $P_3^{11}$  und  $P_3^{22}$  nicht, wie eventuell zu erwarten wäre, auf die Eigenräume  $\mathcal{E}_3^1$  und  $\mathcal{E}_3^2$ , sondern auf die von den Erzeugendensystemen  $\{P_3^{11}, P_3^{12}\}$  und  $\{P_3^{22}, P_3^{21}\}$  aufgespannten Untervektorräume

$$\text{im}(P_3^{11}) = \text{span} \{P_3^{11}, P_3^{12}\}, \quad (3.3.18a)$$

$$\text{im}(P_3^{22}) = \text{span} \{P_3^{21}, P_3^{22}\}, \quad (3.3.18b)$$



welche aber nicht die gewünschte Invarianz aufweisen. Mit Hilfe der Operatoren  $P_3^{12}$  und  $P_3^{21}$  lassen sich jedoch die zugehörigen orthogonalen Partner in dem jeweils anderen Raum identifizieren, die zusammen die gesuchten Eigenräume aufspannen. Präzisierte und allgemein gültige Eigenschaften dieser Abbildungsvorschriften werden im nächsten Abschnitt gegeben.

### 3.3.2 Eigenschaften der Projektionsoperatoren

Bisher wurde die durch eine Gruppe erzeugte Algebra als exemplarischer Vektorraum zur Verdeutlichung der Vorgehensweise beim Auffinden von simultanen, invarianten Untervektorräumen der Elemente einer Symmetriegruppe herangezogen. Die im vorherigen Abschnitt gefundenen Zusammenhänge sollen nun auf beliebige  $G$ -invariante Vektorräume, die damit zugleich Darstellungsräume dieser Gruppe sind, ausgedehnt werden. Neben sinnvoll definierten Symmetrietransformationen  $T(g) : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$  soll weiterhin ein Skalarprodukt  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  auf dem betrachteten Vektorraum  $\mathcal{V}$  erklärt sein, worauf aufbauend eine neue Bilinearform

$$\langle v_1, v_2 \rangle_T := \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \langle T(g)v_1, T(g)v_2 \rangle, \quad v_1, v_2 \in \mathcal{V} \quad (3.3.19)$$

gebildet werden kann, welche invariant gegenüber den Symmetrietransformationen der Gruppe  $G$  ist:

$$\langle T(g)v_1, T(g)v_2 \rangle_T = \langle v_1, v_2 \rangle_T, \quad \forall g \in G. \quad (3.3.20)$$

Damit wird die vorteilhafte Übertragung der Unitaritätseigenschaft der abstrakten Gruppenelemente auf die der Symmetrieeoperatoren erreicht

$$T(g)^\star = T(g)^{-1}, \quad (3.3.21)$$

so dass die grundlegenden Aussagen zur Spektralzerlegung der Symmetrieeoperatoren ihre Gültigkeit behalten. Folglich bleiben ihre Eigenwerte sowie Spektraldarstellungen unverändert. Einzig der Entartungsgrad der gesuchten simultanen Eigenräume variiert abhängig vom zugrunde liegenden Darstellungsraum, da dessen Dimension auch kleiner oder größer als die der regulären Darstellung der Gruppe sein kann.

In Analogie zur abstrakten Gruppe sollen nun die Symmetrieeoperatoren  $T(g)$  Basiselemente einer Gruppenalgebra über den komplexen Zahlen sein, in der die Addition und Vervielfachung der erzeugenden Elemente in einer zur Definition nach Gleichung (3.2.45) verträglichen Weise durch ihre punktweise Anwendung auf die Elemente des Vektorraums

$$[T(g_1) + T(g_2)]v := T(g_1)v + T(g_2)v, \quad v_1, v_2 \in \mathcal{V}, \quad (3.3.22a)$$

$$[cT(g)]v := c[T(g)v], \quad c \in \mathbb{C}, v \in \mathcal{V} \quad (3.3.22b)$$

erklärt ist. Aus der so konstruierten Gruppenalgebra sollen die aus den Komponenten der unitären Darstellungsmatrizen des vollständigen Satzes inäquivalenter, irreduzibler Darstellungen der Gruppe  $G$  gebildeten Operatoren

$$P_{\mathbf{R}}^{(ij)} = \frac{d_{\mathbf{R}}}{|G|} \sum_{g \in G} [\mathbf{R}(g)]_{ij}^\star T(g), \quad \mathbf{R} \in \mathcal{R}, \quad i, j \in [1, d_{\mathbf{R}}], \quad (3.3.23)$$

die auch als Komponenten  $P_{\mathbf{R}}^{(ij)} = [\mathbf{P}_{\mathbf{R}}]_{ij}$  einer Operatormatrix

$$\mathbf{P}_{\mathbf{R}} = \frac{d_{\mathbf{R}}}{|G|} \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^{\star} T(g), \quad \mathbf{R} \in \mathcal{R} \quad (3.3.24)$$

aufgefasst werden können, näher untersucht werden. Die Wirkung dieser Operatormatrix, deren formale Einführung eine auf dem Matrizenkalkül aufbauende kompakte und übersichtliche Schreibweise gestattet, ist dabei in vollkommener Analogie zur Multiplikation einer Matrix mit einem Skalar elementweise definiert

$$\mathbf{P}_{\mathbf{R}} : v \mapsto \mathbf{v}_{\mathbf{R}}, \quad \mathbf{P}_{\mathbf{R}} : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}^{d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}}}, \quad \text{mit } [\mathbf{v}_{\mathbf{R}}]_{ij} := P_{\mathbf{R}}^{(ij)} v, \quad (3.3.25)$$

so dass eine aus den einzelnen transformierten Funktionen bestehende Matrix gleicher Gestalt resultiert. Eine Reihe wichtiger Eigenschaften dieser linearen und kontinuierlichen Operatoren, für die zunächst nur bekannt ist, dass sie eine Abbildung des Vektorraumes  $\mathcal{V}$  in sich vermitteln, lässt sich aus der bemerkenswerten Relation

$$P_{\mathbf{R}_{\mu}}^{(ij)} P_{\mathbf{R}_{\nu}}^{(kl)} = \delta_{\mu\nu} \delta_{jk} P_{\mathbf{R}_{\mu}}^{(il)}, \quad (3.3.26)$$

die eine unmittelbare Konsequenz aus dem Orthogonalitätstheorem ist, ableiten. Für den adjungierten Operator bzw. die adjungierte Operatormatrix bezüglich des Skalarproduktes nach Gleichung (3.3.19) gilt

$$P_{\mathbf{R}}^{(ij)\star} = P_{\mathbf{R}}^{(ji)} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{P}_{\mathbf{R}}^H = \mathbf{P}_{\mathbf{R}}, \quad (3.3.27)$$

woraus in Verbindung mit Gleichung (3.3.26) sofort folgt, dass die Operatoren  $P_{\mathbf{R}}^{(ii)}$  hermitesch und idempotent sind

$$P_{\mathbf{R}}^{(ii)^2} = P_{\mathbf{R}}^{(ii)}, \quad P_{\mathbf{R}}^{(ii)\star} = P_{\mathbf{R}}^{(ii)} \quad (3.3.28)$$

und mithin Orthogonalprojektionen vermitteln. Da diese Projektoren unter Verweis auf die Vollständigkeitsrelation eine Zerlegung der Eins bilden

$$\sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^{d_{\mathbf{R}_k}} P_{\mathbf{R}_k}^{(ii)} = \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} \text{tr} \{ \mathbf{P}_{\mathbf{R}} \} = T(e), \quad (3.3.29)$$

zerfällt somit der Vektorraum in zueinander komplementäre, paarweise orthogonale Untervektorräume  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(i)}$

$$\mathcal{V} = \bigoplus_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} \bigoplus_{i=1}^{d_{\mathbf{R}}} \mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(i)}, \quad \text{mit } \mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(i)} = \text{im} \{ P_{\mathbf{R}}^{(ii)} \}. \quad (3.3.30)$$

Die übrigen Elemente der Operatormatrix, die nur für den Fall mehrdimensionaler, irreduzibler Darstellungen auftreten, sind nilpotente Operatoren, deren in Abbildung (3.5) grafisch veranschaulichte Null- und Bildräume leicht anhand von Gleichung (3.3.26) durch geeignete Wahl der Indizes deduzierbar sind. So lässt sich wegen

$$P_{\mu}^{(ij)} P_{\nu}^{(kk)} v = 0, \quad \text{für: } \mu \neq \nu \vee j \neq k, \quad \forall v \in \mathcal{V} \quad (3.3.31)$$

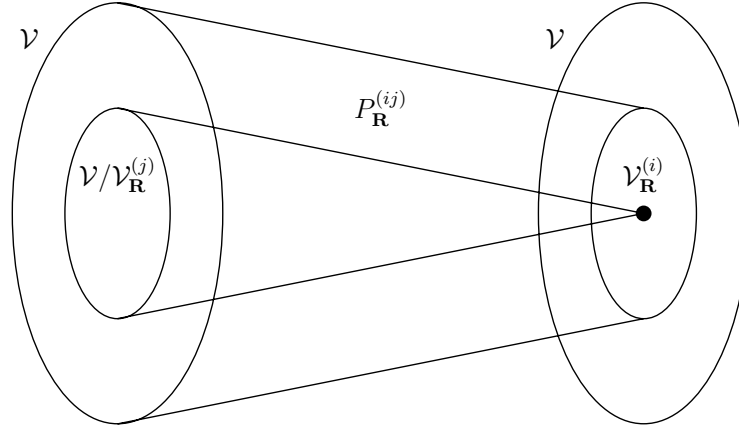


Abbildung 3.5: Grafische Veranschaulichung des Kerns und des Bildes der aus den irreduziblen Darstellungsmatrizen konstruierten Operatoren  $P_{\mathbf{R}}^{(ij)}$ .

schlussfolgern, dass der Quotientenraum von  $\mathcal{V}$  nach  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(j)}$  durch  $P_{\mathbf{R}}^{(ij)}$  auf den Nullvektor abgebildet wird und somit als Kern dieser Abbildung identifiziert werden kann. Umgekehrt liegt das Bild dieses Operators stets im Untervektorraum  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(i)}$ , da

$$P_{\nu}^{(kk)} P_{\mu}^{(ij)} v = P_{\mu}^{(ij)} v, \quad \text{für: } \mu = \nu \wedge i = k, \quad \forall v \in \mathcal{V} \quad (3.3.32)$$

gilt. Nach dem Homomorphiesatz folgt damit unmittelbar, dass der Operator  $P_{\mathbf{R}}^{(ij)}$  einen Isomorphismus zwischen den beiden Untervektorräumen  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(j)}$  und  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(i)}$  induziert, die demzufolge die gleiche Mächtigkeit aufweisen müssen. Für den Spezialfall  $i = j$  entspricht dieser erwartungsgemäß der identischen Abbildung. Durch Vertauschen der Indizes lässt sich unter der genannten Einschränkung auf die beiden Untervektorräume der zu  $P_{\mathbf{R}}^{(ij)}$  inverse Operator angeben, der aufgrund von Gleichung (3.3.27) gerade seiner Adjungierten entspricht und demzufolge unitär ist:

$$\mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(j)} = \text{im}\{P_{\mathbf{R}}^{(jj)}\} \xrightleftharpoons[P_{\mathbf{R}}^{(ji)}]{P_{\mathbf{R}}^{(ij)}} \mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(i)} = \text{im}\{P_{\mathbf{R}}^{(ii)}\}. \quad (3.3.33)$$

Formale Anwendung einer Symmetrieoperation auf das Bild des Operators  $P_{\mathbf{R}}^{(ij)}$  bringt einen weiteren fundamentalen Zusammenhang hervor

$$T(g) P_{\mathbf{R}}^{(ij)} = \sum_{k=1}^{d_{\mathbf{R}}} [\mathbf{R}(g)]_{ki} P_{\mathbf{R}}^{(kj)}, \quad (3.3.34)$$

welcher in Matrixschreibweise die Gestalt

$$T(g) \mathbf{P}_{\mathbf{R}} = \mathbf{R}(g^{-1})^* \mathbf{P}_{\mathbf{R}} \quad (3.3.35)$$

annimmt und wegen seiner enormen Bedeutung im Weiteren die Bezeichnung „Symmetrierelation“ tragen soll. Bildung der Spur auf beiden Seiten der Gleichung (3.3.35) und anschließende Summation über den vollständigen Satz der irreduziblen Darstellungen liefert unter Berücksichtigung von Gleichung (3.3.29) eine Spektraldarstellung der Symmetrieeoperatoren der Form

$$T(g) = \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} \text{tr} \{ \mathbf{R}(g^{-1})^* \mathbf{P}_{\mathbf{R}} \}, \quad (3.3.36)$$

die somit alle eine gleichartige Blockdiagonalgestalt besitzen. Zur Feststellung simultaner Eigenräume der zugrunde liegenden Operatorgruppe wird das Verhalten der Elemente der Untervektorräume  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(i)}$  unter Symmetrietransformationen näher analysiert. Bei Vorliegen eindimensionaler Darstellungen  $d_{\mathbf{R}} = 1$  bewirken diese Transformationen einzig eine Skalierung der Vektoren aus dem Unterraum  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(1)}$ , so dass jeder Vektor selbst einen eindimensionalen Darstellungsraum aufspannt und damit auch der Bildraum des Projektors  $P_{\mathbf{R}}^{(11)}$  invariant unter allen Transformationen ist. Anders dagegen verhält es sich im Fall mehrdimensionaler Darstellungen  $d_{\mathbf{R}} > 1$ . Das Bild eines Vektors aus  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(i)}$  setzt sich nach Gleichung (3.3.35) und unter Berücksichtigung der gefundenen Abbildungseigenschaften der Operatoren  $P_{\mathbf{R}}^{(ij)}$  aus der gewichteten Summe von Vektoren aus allen Räumen  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(k)}$  mit  $k \in [1, d_{\mathbf{R}}]$  zusammen. Das bedeutet, dass lediglich das Bild

$$\mathcal{V}_{\mathbf{R}} = \bigoplus_{i=1}^{d_{\mathbf{R}}} \mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(i)} = \text{im}(P_{\mathbf{R}}) \quad (3.3.37)$$

des als Summe der Orthogonalprojektoren  $P_{\mathbf{R}}^{(ii)}$  definierten Charakterprojektors

$$P_{\mathbf{R}} = \sum_{i=1}^{d_{\mathbf{R}}} P_{\mathbf{R}}^{(ii)} = \frac{d_{\mathbf{R}}}{|G|} \sum_{g \in G} \chi(g)^* T(g) \quad (3.3.38)$$

bezüglich aller Symmetrieeoperatoren invariant und damit ein simultaner Eigenraum ist. Diese Eigenschaft trifft zwar nicht auf dessen Unterräume  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(i)}$  zu, da jedoch die Abbildung in Gleichung (3.3.33) einen eindeutigen Zusammenhang zwischen ihnen herstellt und somit die Identifikation der zusammengehörenden Partnerfunktionen eines invarianten Untervektorraumes ermöglicht, ist die Zerlegung des Bildraums  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}$  des Charakterprojektors in  $d_{\mathbf{R}}$ -dimensionale, irreduzible Darstellungsräume gewährleistet<sup>15</sup>.

Es soll noch einmal betont werden, dass die Bildräume  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}} = \text{im}(P_{\mathbf{R}})$  der Charakterprojektoren  $P_{\mathbf{R}}$  den gesuchten simultanen Eigenräumen zu paarweise verschiedenen Eigenwertsätzen, die als irreduzible Darstellungen identifiziert werden können, entsprechen. Vektoren aus dem Eigenraum  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}$  sind vom  $\mathbf{R}$ -ten *Symmetriotyp*, die Anzahl verschiedener Symmetriotypen stimmt daher mit der maximalen Anzahl der inäquivalenten irreduziblen Darstellungen überein [65]. Die Dimension des Eigenraumes  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}$  hängt von der Größe des betrachteten Darstellungsraumes ab. Da jeder Eigenraum  $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}$  weiter in irreduzible Darstellungsräume  $\mathcal{E}_{\mathbf{R}}^{(i)}$  vom gleichen Symmetriotyp mit  $\dim\{\mathcal{E}_{\mathbf{R}}^{(i)}\} = d_{\mathbf{R}}$  zerlegbar ist

$$\mathcal{V}_{\mathbf{R}} = \bigoplus_i \mathcal{E}_{\mathbf{R}}^{(i)}, \quad (3.3.39)$$

muss dessen Dimension folglich ein ganzzahliges Vielfaches von der Dimension der zugehörigen irreduziblen Darstellung sein.

Basierend auf dem durch die Symmetrierelation charakterisierten Transformationsverhalten der Elemente aus diesen Räumen haben sich in der Chemie und Physik eigenständige Symbole zur Kennzeichnung der unterschiedlichen irreduziblen Darstellungen  $\mathbf{R}$  durchgesetzt, die damit eine einfache und auch anschauliche Einteilung der Symmetriotypen

<sup>15</sup>Diese Reduktion wird auch als Zerlegung nach den irreduziblen Darstellungen bezeichnet [65].

gestattet. Dieser von MULLIKEN<sup>16</sup> eingeführten Namenskonvention wird sich in dieser Arbeit ebenfalls angeschlossen:

- Simultane Eigenräume, die sich nach eindimensionalen, irreduziblen Darstellungen zerlegen lassen und symmetrisch (antisymmetrisch) bezüglich der Drehung  $C_n$  um die Hauptdrehachse sind, sind vom Symmetrietyp  $A$  ( $B$ ).
- Simultane Eigenräume, die sich nach zweidimensionalen (dreidimensionalen) irreduziblen Darstellungen zerlegen lassen, sind vom Symmetrietyp  $E$  ( $T$ ).
- Für den Fall, dass die Gruppe ein Inversionszentrum besitzt, erhalten die Eigenräume vom Typ  $A$ ,  $B$ ,  $E$  oder  $T$  das Attribut „gerade“ („ungerade“), wenn sie symmetrisch (antisymmetrisch) bezüglich der Inversion  $i$  sind. Diese Eigenschaft wird durch den Index „g“ („u“) gekennzeichnet.
- Für Gruppen mit horizontaler Spiegelebene wird eine Symmetrie (Antisymmetrie) der Eigenräume vom Typ  $A$ ,  $B$ ,  $E$  oder  $T$  bezüglich der Spiegelung  $\sigma_h$  an dieser Ebene durch ein Apostroph (doppelten Apostroph) am Symbol gekennzeichnet.
- Existiert eine vertikale Spiegelebene oder eine zur Hauptdrehachse senkrechte, zweizählige Drehachse, so wird eine Symmetrie (Antisymmetrie) der Eigenräume vom Typ  $A$  oder  $B$  bezüglich der zugehörigen Operation  $C_2$  oder  $\sigma_v$  durch den Index „1“ („2“) kenntlich gemacht.

Anzumerken ist, dass der Eigenraum als symmetrisch (antisymmetrisch) bezüglich einer bestimmten Transformation  $g$  bezeichnet wird, wenn das Vorzeichen beibehalten (umgekehrt) wird, das mathematisch durch  $\chi(g) = \pm 1$  ausgedrückt werden kann.

Eine besondere Stellung nimmt der zur trivialen Einsdarstellung gehörende Symmetrietyp  $A_g$  bzw.  $A'$  ein, der in jedem Darstellungsraum vertreten ist. Elemente dieses Typs bleiben unter sämtlichen Symmetrietransformationen der Gruppe unverändert und werden folglich als *totalsymmetrisch* charakterisiert. Die Abbildung in diesen Untervektorraum wird dabei von dem REYNOLD-Projektor

$$P_1 = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} T(g) \quad (3.3.40)$$

geleistet. Diese Operation lässt sich im abstrakten Sinn als eine Mittelung über Gruppen interpretieren.

### 3.3.3 Abstrakte harmonische Analyse

Die Elemente der Operatormatrix  $\mathbf{P}_R$  bilden auf die Eigenräume der Symmetriegruppe, die invariant unter allen Symmetrieeoperatoren dieser Gruppe sind, ab. Da die Projektoren  $P_R^{(ii)}$  eine Zerlegung der Eins bilden, ist jeder Vektor  $v$  des Darstellungsraums  $\mathcal{V}$  einer

<sup>16</sup>Robert Sanderson Mulliken, 1896–1986, US-amerikanischer Physiker und Chemiker

Gruppe  $G$  in seine *symmetrischen Komponenten*  $v_{\mathbf{R}}^{(ii)}$ , die paarweise zueinander orthogonal bezüglich des Skalarprodukts in Gleichung (3.3.19) sind, zerlegbar:

$$v = \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} \sum_{i=1}^{d_{\mathbf{R}}} v_{\mathbf{R}}^{(ii)} = \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} \text{tr} \{ \mathbf{v}_{\mathbf{R}} \}, \quad \text{mit: } \mathbf{v}_{\mathbf{R}} = \mathbf{P}_{\mathbf{R}} v. \quad (3.3.41)$$

Bei mehrdimensionalen Darstellungen resultieren im Allgemeinen mehrere Symmetriekomponenten gleichen Typs, die sich dementsprechend durch identische Symmetrieeigenschaften, welche durch die Symmetrierelation wiedergegeben ist, auszeichnen. Dieses Konzept ist vergleichbar mit dem der klassischen FOURIER-Transformation, weshalb in diesem Zusammenhang auch von harmonischer Analyse auf finiten Gruppen gesprochen wird. Das Prinzip der harmonischen Analyse beruht bekanntlich darauf, eine Funktion in die Eigenbasis eines bestimmten linearen Operators, die als vollständig und orthonormal angenommen werden soll, zu entwickeln, um die damit einhergehende Invarianz der so erhaltenen harmonischen Komponenten bezüglich dieses Operators vorteilhaft ausnutzen zu können. Bei der Zerlegung einer Funktion in Symmetriekomponenten liegen die simultanen Eigenräume der Gruppe der Symmetrieeoperatoren, die jedoch im Allgemeinen entartet sind, zugrunde. Bei Darstellungsräumen mit unendlicher Dimension werden diese, da es bei den hier betrachteten finiten Gruppen nur endlich viele Eigenräume gibt, ebenfalls unendlich-dimensional sein. Aus diesem Grund können die aus einer harmonischen Analyse auf Gruppen resultierenden Symmetriekomponenten auch nicht in Form gewichteter, eindeutig bestimmter Basisfunktionen wie bei den Komponenten der FOURIER-Reihe dargestellt werden.

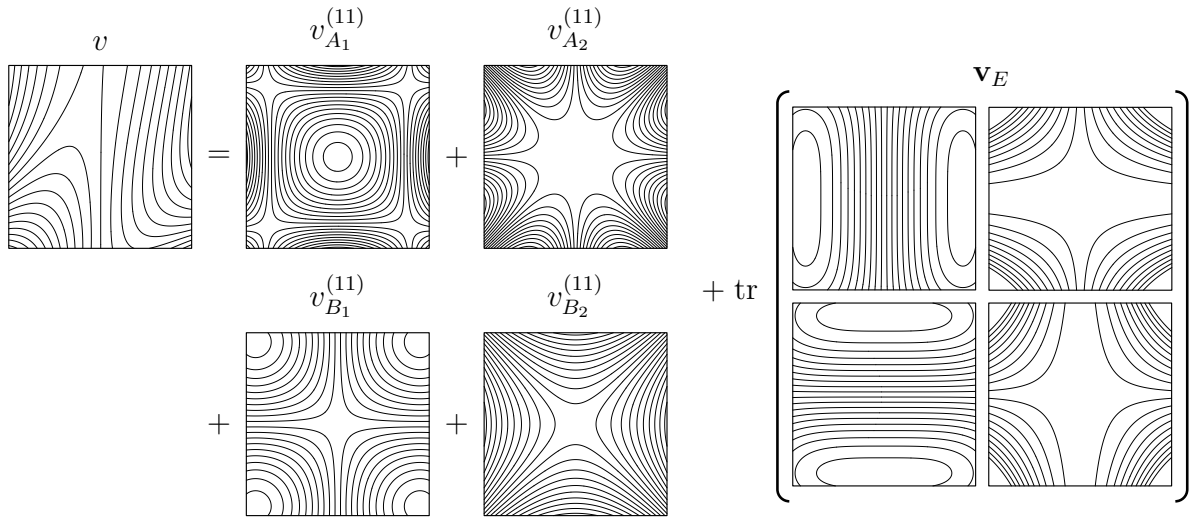


Abbildung 3.6: Veranschaulichung der abstrakten harmonischen Analyse eines Skalarfeldes. Gezeigt ist die Zerlegung einer skalarwertigen Funktion, die durch ihre Äquipotentiallinien repräsentiert wird, in ihre Symmetriekomponenten bezüglich der  $C_{4v}$ -Gruppe. Komponenten vom Symmetriotyp  $E$  bilden zusammen mit ihrem Entartungspartner einen Symmetriesatz, der einen zweidimensionalen irreduziblen Darstellungsraum aufspannt.

Im Gegensatz zur klassischen FOURIER-Zerlegung tritt speziell bei der harmonischen Analyse auf nichtkommutativen Gruppen die Besonderheit auf, dass Eigenräume bestimmter Symmetrietypen nicht in eindimensionale irreduzible Darstellungsräume zerlegbar sind.

Folglich sind die Symmetriekomponenten dieses Typs nicht invariant unter der Gruppe der Symmetrieoperatoren, andernfalls würden sie im Widerspruch zur angenommenen Irreduzibilität einen eindimensionalen Darstellungsraum aufspannen. Allerdings bildet jede Symmetriekomponente  $v_{\mathbf{R}}^{(ii)}$  zusammen mit ihren *Entartungspartnern*  $v_{\mathbf{R}}^{(ki)}$  mit  $k \neq i$  eine *symmetrieadaptierte* Orthogonalbasis eines  $d_{\mathbf{R}}$ -dimensionalen irreduziblen Darstellungsraumes vom  $\mathbf{R}$ -ten Symmetrietyp

$$\mathcal{E}_{\mathbf{R}}^{(i)} = \{v_{\mathbf{R}}^{(ki)} = P_{\mathbf{R}}^{(ki)}v : k \in [1, d_{\mathbf{R}}]\}, \quad i \in [1, d_{\mathbf{R}}], \quad (3.3.42)$$

die auch als *Symmetriesatz* zur Darstellung  $\mathbf{R}$  bezeichnet wird [17]. Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass jede Spalte der Funktionenmatrix  $\mathbf{v}_{\mathbf{R}}$  einem Symmetriesatz entspricht, wohingegen die Elemente der  $i$ -ten Zeile im Bildbereich des Orthogonalprojektors  $P_{\mathbf{R}}^{(ii)}$  liegen.

In Abbildung 3.6 ist die harmonische Analyse auf finiten Gruppen am Beispiel eines Skalarfeldes, das durch seine Äquipotentiallinien repräsentiert ist und Element eines Darstellungsraumes der  $C_{4v}$ -Gruppe sein soll, illustriert. Zu jeder Symmetriekomponente vom Typ  $E$  gehört eine Partnerfunktion, die zusammen einen Symmetriesatz bilden. Aus dieser Grafik ist erkennbar, dass bestimmte Symmetrieoperationen die Elemente eines Symmetriesatzes ineinander transformieren. Durch Superposition aller Symmetriekomponenten lässt sich die ursprüngliche Funktion synthetisieren.





# Kapitel 4

## Symmetriereduktion der elektrischen Feldintegralgleichung

*Mit Hilfe des im vorherigen Kapitel erarbeiteten Formalismus ist es möglich, Randwertaufgaben aus einer bestimmten Problemklasse in voneinander unabhängige Teilprobleme, die lediglich auf einer Symmetriezone des Rechengebietes definiert sind, zu zerlegen, um so den Aufwand bei einer numerischen Behandlung herabsetzen zu können. Im ersten Abschnitt werden die generellen Voraussetzungen für die Anwendbarkeit der Methode der Symmetriezellenreduktion auf lineare Operatorgleichungen zusammengefasst sowie deren grundlegendes Konzept erläutert. Weiterhin werden die Auswirkung einer symmetrischen Anregung auf die reduzierten Modellgleichungen sowie die Zerlegung der Eigenräume eines linearen Operators nach den irreduziblen Darstellungen der Symmetriegruppe näher untersucht und diskutiert. Diesen allgemeinen Betrachtungen schließt sich die konkrete Umsetzung dieses Konzepts im Rahmen der Randelementmethode an, deren Grundlage die elektrische Feldintegralgleichung sein soll. Einen Schwerpunkt bildet neben der Ableitung passender Bedingungen auf den durch die geometrische Reduktion entstehenden Schnittträgern der Symmetriezone auch die Konstruktion entsprechender lokaler Basisfunktionen für diese Kanten, die für eine Diskretisierung der reduzierten Gleichungen, der sich anschließend ausführlich gewidmet wird, unentbehrlich sind. Abschließend wird der erforderliche Aufwand zur Lösung der reduzierten Modellgleichungen im Vergleich zu der des Ausgangsproblems abgeschätzt und die erzielbaren Reduktionsfaktoren für die Rechenzeit sowie für den Speicherbedarf angegeben.*

### 4.1 Grundlegendes Konzept

#### 4.1.1 Separation linearer Operatorgleichungen

Die gewünschte symmetriebasierte Problemreduktion ist neben der notwendigen Bedingung des Vorhandenseins einer geometrischen Symmetrie des Rechengebietes an weitere essentielle Forderungen bezüglich der Definition der Gruppen von Symmetrieeoperatoren sowie an bestimmte Eigenschaften der mathematischen Modellgleichungen geknüpft, die

bereits in den vorangegangenen Abschnitten sukzessive erarbeitet wurden und nachfolgend übersichtlich zusammengestellt und erörtert werden sollen. Zu diesem Zweck wird von einer, als wohlgestellt angenommenen Randwertaufgabe der allgemeinen Form

$$\mathcal{L}u = v \quad \text{auf } \Omega, \quad u \in \mathcal{U}(\Omega), \quad v \in \mathcal{V}(\Omega), \quad (4.1.1a)$$

$$\mathcal{B}u = w \quad \text{auf } \Gamma, \quad u \in \mathcal{U}(\Omega), \quad w \in \mathcal{W}(\Gamma) \quad (4.1.1b)$$

ausgegangen. Hierin symbolisiert  $\mathcal{L}$  eine lineare, bijektive Abbildung zwischen dem Raum der Lösungsfunktionen und dem der Anregungen, die auf einem Gebiet beliebiger Dimension  $\Omega$  erklärt sind. Zur Erfassung der vorgegebenen Werte auf der Berandung  $\Gamma = \partial\Omega$  dient der Randoperator  $\mathcal{B}$ . Überdies wird vorausgesetzt, dass das Rechengebiet die Symmetrie der Gruppe  $G$  besitzt und die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

- **Invarianz der Vektorräume:** Alle beteiligten Vektorräume müssen Darstellungsräume der zugrunde liegenden Symmetriegruppe  $G$  und damit invariant unter sämtlichen Symmetrieoperationen sein:

$$T(g)u \in \mathcal{U}, \quad \forall g \in G, \quad \forall u \in \mathcal{U}, \quad (4.1.2a)$$

$$\hat{T}(g)v \in \mathcal{V}, \quad \forall g \in G, \quad \forall v \in \mathcal{V}, \quad (4.1.2b)$$

$$\bar{T}(g)w \in \mathcal{W}, \quad \forall g \in G, \quad \forall w \in \mathcal{W}. \quad (4.1.2c)$$

Unter dieser Voraussetzung vermitteln die Symmetrieeoperatoren lineare, bijektive Abbildungen der angegebenen Vektorräume auf sich selbst. Diese Forderung schränkt im euklidischen Raum die Zahl zulässiger Symmetrietransformationen einer geometrischen Struktur ein und legt folglich deren Symmetriegruppe fest. Da auf Funktionenräumen erklärte Symmetrietransformationen typischerweise auf Koordinatentransformationen des Ortsraumes basieren, definieren alleinig die Symmetrieeigenschaften der geometrischen Struktur eine mögliche Symmetrie des physikalischen Systems. Notwendige Bedingung für die Invarianz eines Funktionenraums gegenüber einer bestimmten Symmetriegruppe ist demzufolge die geometrische Symmetrie des Rechengebiets.

- **Isomorphie zwischen Symmetriegruppen:** Da im Allgemeinen Definitionsbereich und Wertebereich eines linearen Operators nicht übereinstimmen, ist eine getrennte Festlegung der Symmetrietransformationen für beide Funktionenräume unvermeidbar. Dies darf keineswegs willkürlich erfolgen, sondern muss stets eine strukturerhaltende Beziehung zwischen den beteiligten Symmetriegruppen sicherstellen. Wird weiterhin angenommen, dass die Gruppen von Symmetrieeoperatoren die gleiche Ordnung besitzen, so sind sie zueinander isomorph:

$$T(G) \cong \hat{T}(G) \cong \bar{T}(G). \quad (4.1.3)$$

- **Äquivarianz der linearen Operatoren:** Als letzte wichtige Bedingung ist die mathematische Umsetzung der geforderten Invarianz physikalischer Gesetzmäßigkeiten unter bestimmten Koordinatentransformationen zu nennen. Das bedeutet, dass die Zuordnung zwischen den Elementen des Definitionsbereiches und denen

des Wertebereiches nach Anwendung einer Symmetrietransformation unverändert bleibt, womit folgende Diagramme kommutieren:

$$\begin{array}{ccc}
 \mathcal{U} & \xrightarrow{\mathcal{L}} & \mathcal{V} \\
 \uparrow T(g^{-1}) & & \uparrow \hat{T}(g^{-1}) \\
 \mathcal{U} & \xrightarrow{\mathcal{L}} & \mathcal{V} \\
 \downarrow T(g) & & \downarrow \hat{T}(g)
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{ccc}
 \mathcal{U} & \xrightarrow{\mathcal{B}} & \mathcal{W} \\
 \uparrow T(g^{-1}) & & \uparrow \bar{T}(g^{-1}) \\
 \mathcal{U} & \xrightarrow{\mathcal{B}} & \mathcal{W} \\
 \downarrow T(g) & & \downarrow \bar{T}(g)
 \end{array}$$

Damit müssen die Bedingungen

$$\hat{T}(g) \mathcal{L} = \mathcal{L} T(g), \quad \bar{T}(g) \mathcal{B} = \mathcal{B} T(g), \quad (4.1.4)$$

die die Vertauschbarkeit der linearen Operatoren  $\mathcal{L}$  und  $\mathcal{B}$  mit allen Elementen der Symmetriegruppe wiedergibt, erfüllt sein. Lineare Abbildungen mit dieser Eigenschaft werden auch als *äquivariant* bezüglich der Gruppe  $G$  bezeichnet. Die Äquivarianz des Randoperators  $\mathcal{B}$  bedeutet, dass sich der Typ der Randbedingung, wie beispielsweise eine DIRICHLETsche Bedingung, in jedem Punkt durch eine Symmetrietransformation nicht ändern darf.

Die Zerlegung eines Funktionenraums in invariante Unterräume kann bekanntlich die Lösung einer linearen Operatorgleichung wesentlich vereinfachen. Bei Endomorphismen ist dies durch eine Spektralzerlegung erreichbar, die zu einer Diagonalisierung des Operators führt, so dass das Problem separat für jeden Eigenraum gelöst werden kann. Ein bekanntes Beispiel hierfür ist die FOURIER-Transformation, die auf Basis der eindimensionalen Eigenräume des Differentialoperators eine lineare Differentialgleichung in eine algebraische Gleichung überführt. Diesem vielversprechenden Ansatz steht jedoch der entscheidende Nachteil gegenüber, dass eine Spektralzerlegung entweder mit einem sehr hohen Aufwand verbunden oder überhaupt nicht durchführbar ist, so dass deren Anwendbarkeit auf wenige Spezialfälle beschränkt ist. Insbesondere sind die Spektren der hier interessierenden Integral- und Integrodifferentialoperatoren im mehrdimensionalen euklidischen Raum gewöhnlich nicht exakt bestimmbar.

Bei symmetriereduzierenden Verfahren wird der Umstand genutzt, dass lineare Operatoren, die kommutieren, identische Eigenräume besitzen. Der Definitionsbereich und Bildbereich eines linearen Operators, der mit einer Gruppe von Symmetrietransformationen kommutiert, ist folglich in dieselben invarianten Unterräume wie die der Symmetriegruppe zerlegbar. Zum Beweis wird die Operatormatrix aus Gleichung (3.3.24) formal von links auf die Operatorgleichung (4.1.1a) angewendet:

$$\hat{\mathbf{P}}_{\mathbf{R}} \mathcal{L} u = \hat{\mathbf{P}}_{\mathbf{R}} v, \quad \text{mit: } \hat{\mathbf{P}}_{\mathbf{R}} = \frac{d_{\hat{\mathbf{R}}}}{|G|} \sum_{g \in G} \hat{\mathbf{R}}(g)^* \hat{T}(g). \quad (4.1.5)$$

Aufgrund der vorausgesetzten Äquivarianz und Linearität des Operators  $\mathcal{L}$  kommutiert dieser auch mit den aus Linearkombinationen der Symmetrietransformationen aufgebauten Operatoren  $P_{\mathbf{R}}^{(ij)}$ . Irreduzible Darstellungen zueinander isomorpher Gruppen sind äquivalent und können ohne Beschränkung der Allgemeingültigkeit identisch gewählt werden:  $\mathbf{R}(G) = \hat{\mathbf{R}}(G)$ . Damit nimmt Gleichung (4.1.5) die Gestalt

$$\mathcal{L} \mathbf{P}_{\mathbf{R}} u = \hat{\mathbf{P}}_{\mathbf{R}} v, \quad \text{mit: } \mathbf{P}_{\mathbf{R}} = \frac{d_{\mathbf{R}}}{|G|} \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* T(g) \quad (4.1.6)$$

an, wobei die Wirkung des linearen Operators  $\mathcal{L}$  auf die Funktionenmatrix  $\mathbf{u}_{\mathbf{R}}$  komponentenweise erklärt ist:  $[\mathcal{L}\mathbf{u}_{\mathbf{R}}]_{ij} = \mathcal{L}[\mathbf{u}_{\mathbf{R}}]_{ij}$ . Aus der Gültigkeit dieser Gleichung für alle Vektoren des Definitionsbereiches und Wertebereiches lässt sich schließen, dass der Operator  $\mathcal{L} : \mathcal{U}_{\mathbf{R}}^{(i)} \rightarrow \mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(i)}$ ,  $\forall \mathbf{R} \in \mathcal{R}$  mit  $i \in [1, d_{\mathbf{R}}]$  die Bildbereiche der Orthogonalprojektoren  $P_{\mathbf{R}}^{(ii)}$  in die der Projektoren  $\hat{P}_{\mathbf{R}}^{(ii)}$  und somit auch die simultanen Eigenräume der Gruppe  $T(G)$  in die der Gruppe  $\hat{T}(G)$  vom gleichen Typ abbildet. Analog zur Spektralanalyse zerfällt das ursprüngliche Randwertproblem in Gleichung (4.1.1) in die Teilprobleme

$$\mathcal{L}\mathbf{u}_{\mathbf{R}} = \mathbf{v}_{\mathbf{R}} \quad \text{auf } \Omega, \quad \mathbf{u}_{\mathbf{R}} \in \mathcal{U}_{\mathbf{R}}^{d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}}}, \quad \mathbf{v}_{\mathbf{R}} \in \mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}}}, \quad (4.1.7a)$$

$$\mathcal{B}\mathbf{u}_{\mathbf{R}} = \mathbf{w}_{\mathbf{R}} \quad \text{auf } \Gamma, \quad \mathbf{u}_{\mathbf{R}} \in \mathcal{U}_{\mathbf{R}}^{d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}}}, \quad \mathbf{w}_{\mathbf{R}} \in \mathcal{W}_{\mathbf{R}}^{d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}}}, \quad (4.1.7b)$$

die unabhängig voneinander ausgewertet werden können, ohne jedoch den Operator selbst genau analysieren zu müssen. Hierbei ist zu beachten, dass es sich bei den Größen  $\mathbf{u}_{\mathbf{R}}$ ,  $\mathbf{v}_{\mathbf{R}}$  und  $\mathbf{w}_{\mathbf{R}}$  unter Hinweis auf die in Abschnitt 3.3 eingeführte Konvention um Funktionenmatrizen handelt, die sich aus den symmetrischen Komponenten und den zugehörigen Entartungspartnern der Funktionen  $u$ ,  $v$  und  $w$  zusammensetzen. Da für die Rekonstruktion der Gesamtlösung

$$u = \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} \text{tr} \{ \mathbf{u}_{\mathbf{R}} \} \quad (4.1.8)$$

nur die symmetrischen Komponenten von Belang sind, erscheinen die Gleichungen für die Entartungspartner auf den ersten Blick redundant. Bei der weiteren Reduktion des Problems auf ein Teil des Rechengebietes wird sich später jedoch herausstellen, dass die Gleichungen eines Symmetriesatzes über die transformierten Operatoren gekoppelt sind.

Aus den geringen Anforderungen an den Operator, der abgesehen von der Äquivarianz keinen weiteren Einschränkungen unterliegt, ergibt sich der Vorzug einer universellen Einsetzbarkeit dieser Methode. Daneben besticht diese Vorgehensweise durch Einfachheit und systematischen Aufbau. Es genügt allein die Kenntnis der Symmetrie eines physikalischen Systems, um die simultanen Eigenräume angeben oder zumindest leicht reproduzieren zu können, wofür die Gruppen- und Darstellungstheorie die benötigten Werkzeuge zur Verfügung stellt. Wegen der Abhängigkeit der Anzahl invarianter Unterräume und damit des erzielbaren Rechenvorteils von der Ordnung der zugrunde liegenden Gruppe ist man stets bestrebt, die höchstmögliche Symmetrie eines Systems auszunutzen.

### 4.1.2 Fundamentalgebiet geometrischer Strukturen

Um einem physikalischen System eine bestimmte Symmetrie beizumessen, wird üblicherweise mit der Untersuchung des geometrischen Aufbaus auf eine eventuell vorhandene Symmetrie begonnen. Dieses geometrische Objekt entspricht dem Definitionsbereich der Beobachtungsgrößen, welcher gewöhnlich die Eigenschaften eines Gebiets im mathematischen Sinne<sup>1</sup> besitzt. Oftmals kann das Rechengebiet sogar als Untermannigfaltigkeit angesehen werden, deren Dimension kleiner oder gleich der des Anschauungsraums ist. Ein geometrisches Objekt  $\Omega$  besitzt die Symmetrie der Gruppe  $G$ , wenn jeder durch den

---

<sup>1</sup>Eine offene, nichtleere und zusammenhängende Teilmenge eines topologischen Raums wird als Gebiet bezeichnet.

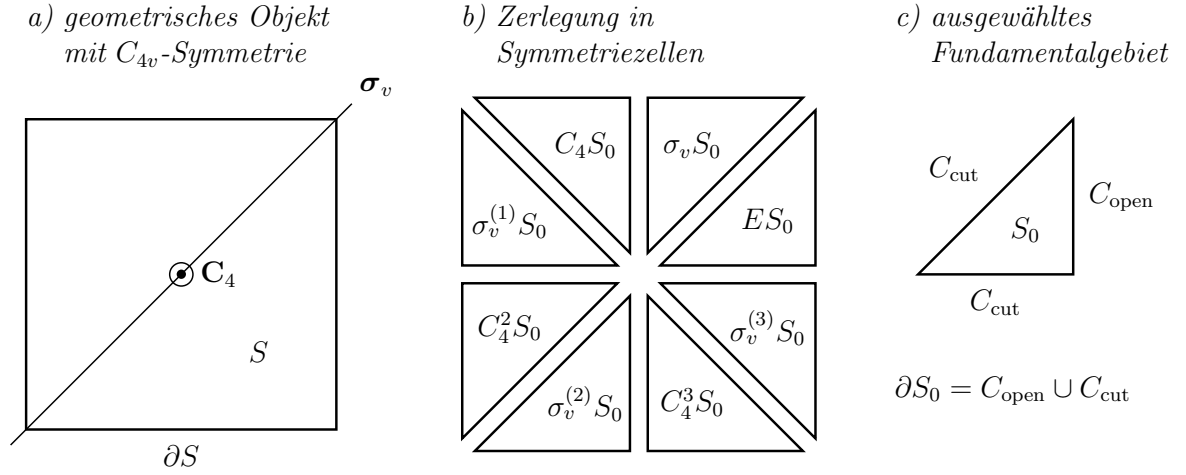


Abbildung 4.1: Definition des Fundamentalgebiets einer geometrischen Figur am Beispiel des Quadrats. Diese flächenhafte Struktur  $S$  besitzt die höchste Symmetrie der  $C_{4v}$ -Gruppe mit den generierenden Elementen  $C_4$  und  $\sigma_v$  (a). Durch Vereinigung der aus den Symmetrietransformationen des Fundamentalgebiets  $S_0$  resultierenden Teilobjekte lässt sich die ursprüngliche Figur erzeugen (b). Neben dem Randabschnitt  $C_{\text{open}} \subseteq \partial S$  tritt bei der Reduktion auf das Fundamentalgebiet zusätzlich die Schnittkante  $C_{\text{cut}}$  auf (c).

Ortsvektor  $\vec{r}$  repräsentierte Punkt durch sämtliche Symmetrietransformationen der Gruppe weiterhin Element dieser Punktmenge ist:

$$g\Omega = \Omega, \quad \forall g \in G, \quad \text{mit: } g\Omega := \{g\vec{r} : \vec{r} \in \Omega\}. \quad (4.1.9)$$

Infolge der Beschränkung auf Teilgebiete des euklidischen Raums, auf denen auch weiterhin die eingeführten Symmetrietransformationen erklärt sind, werden nur bestimmte Elemente aus der Menge aller Isometrien das geometrische Objekt invariant lassen. Die größtmögliche Gruppe zulässiger Symmetrieeoperatoren wird als volle Symmetriegruppe dieses Objekts bezeichnet. Hierbei ist zu beachten, dass nur solche Gruppen in Betracht gezogen werden, deren Elemente bezüglich ihrer Wirkung auf das Gesamtobjekt wohlunterscheidbar sind. Erfüllt ein Gebiet mit Rand  $\Gamma = \partial\Omega$  die Eigenschaft in Gleichung (4.1.9), so ist der Rand ebenfalls invariant unter der Gruppe der Symmetrieeoperatoren

$$g(\partial\Omega) = \partial(g\Omega) = \partial\Omega, \quad \forall g \in G. \quad (4.1.10)$$

Grundlegend für die Reduktion der Gebietsgröße symmetrischer Problemstellungen in der numerischen Feldberechnung ist das Konzept des *Fundamentalgebiets* bzw. der *Symmetriezelle* eines geometrischen Objekts  $\Omega$ , worunter eine abgeschlossene Teilmenge  $\Omega_0$  verstanden wird, die eine Zerlegung des gesamten Rechengebiets der Form

$$\text{cl}\{\Omega\} = \bigcup_{g \in G} g\Omega_0, \quad \text{int}\{g_i\Omega_0 \cap g_j\Omega_0\} = \emptyset \quad \text{für } i \neq j \quad (4.1.11)$$

gestattet. Rein formal entspricht ein derartiges Teilgebiet der Menge aller inäquivalenten Punkte des betrachteten geometrischen Objekts, welches gleich der Vereinigung aller Bahnen dieser Punkte unter Hinzunahme des Randes ist. Aus der Definitionsgleichung (4.1.11)

ist ersichtlich, dass das Fundamentalgebiet somit die kleinstmögliche Teilmenge ist, die ein geometrisches Objekt, welches die Symmetrie der Gruppe  $G$  besitzt, eindeutig festlegt. Demzufolge ist dessen Größe gleich der durch die Gruppenordnung  $|G|$  geteilten Größe des gesamten Gebiets  $\Omega$ . Das Fundamentalgebiet ist im Allgemeinen nicht eindeutig bestimmt, so dass es prinzipiell willkürlich gewählt werden kann. Da jedoch später darauf das reduzierte Problem erklärt wird, sollte es auch den Anforderungen an ein Gebiet genügen und zusammenhängend sein, womit die Zahl der praktisch relevanten Fundamentalgebiete erheblich eingeschränkt wird [17]. Eine besondere Stellung nimmt der Rand des Fundamentalgebiets  $\partial\Omega_0$  ein, da auf diesem für eine vollständige Problemformulierung Randwerte vorgegeben werden müssen. Dieser setzt sich aus einem, vom Rand des ursprünglichen Gebiets herrührenden offenen Anteil

$$\Gamma_{\text{open}} = \partial\Omega \cap \partial\Omega_0 \quad (4.1.12)$$

und einem als *Schnitttrand* bezeichneten Beitrag

$$\Gamma_{\text{cut}} = \partial\Omega_0 \setminus \Gamma_{\text{open}} \quad (4.1.13)$$

zusammen [96]. Schnitttränder als Teilgebiete der Berandung einer Symmetriezelle besitzen somit eine um Eins verminderte Dimension im Vergleich zum Rechengebiet. Bei der Reduktion von Integralgleichungen nehmen die Schnitttränder folglich die Form von Randkurven an. In Abbildung 4.1 ist die Aufteilung einer geometrischen Figur in zueinander kongruente Teilgebiete, die aus Symmetrietransformationen der Symmetriezelle hervorgehen, am Beispiel eines Quadrats, das die Symmetrie der  $C_{4v}$ -Gruppe besitzt, veranschaulicht. Des Weiteren ist ein mögliches Fundamentalgebiet gezeigt und die Bezeichnung der zugehörigen Randabschnitte angegeben. Das Quadrat erscheint zwar auch invariant unter der höheren Symmetriegruppe  $D_{4h}$ , die Spiegelung an der das ebene Objekt enthaltenen Spiegelebene und deren Komposita sind in ihrer Wirkung jedoch nicht von den restlichen Transformationen zu unterscheiden und damit redundant.

### 4.1.3 Geometrische Reduktion

Die Elemente aus den Eigenräumen der Symmetriegruppe weisen bestimmte Symmetrieeigenschaften auf, die sich letztlich in der Symmetrierelation (3.3.34) manifestieren, so dass die zu einem Symmetriesatz gehörenden Funktionen eindeutig durch ihre Werte auf einem Fundamentalgebiet bestimmt sind. Aus diesem Grund sollte es insbesondere im Hinblick auf eine numerische Auswertung möglich sein, eine zum Ausgangsproblem äquivalente Formulierung zu finden, die lediglich auf einer Symmetriezelle definiert ist.

Aus mathematischer Sicht besteht die Aufgabe nun darin, zu den bezüglich der Symmetriegruppe invarianten Unterräumen isomorphe Funktionenräume, deren Elemente auf dem gewählten Fundamentalgebiet erklärt sind, aufzusuchen. Durch die damit unterstellte Existenz einer bijektiven Abbildung zwischen diesen Räumen wird die gewünschte Gleichwertigkeit der Aufgabenstellungen erreicht. Zu diesem Zweck wird eine Beschränkung des Definitionsbereichs der Symmetriesätze auf dieses Gebiet vorgenommen, die formal durch den linearen Restriktionsoperator

$$(W_{\mathbf{R},0}\mathbf{u}_{\mathbf{R}})(\vec{r}) = \mathbf{u}_{\mathbf{R},0}(\vec{r}) := \mathbf{u}_{\mathbf{R}}(\vec{r}), \quad \vec{r} \in \Omega_0 \quad (4.1.14)$$

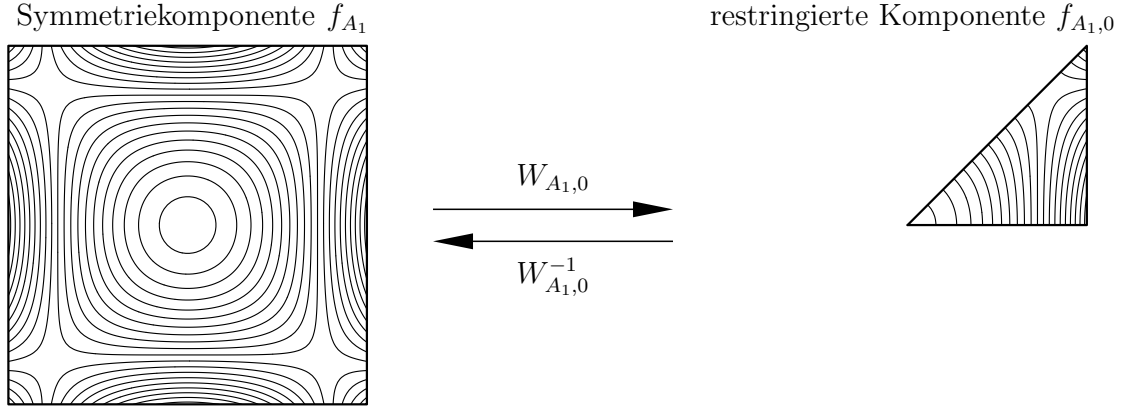


Abbildung 4.2: Veranschaulichung der Restriktion und Rekonstruktion von Symmetriekomponenten als zueinander inverse Operationen. Die totalsymmetrische Komponente des gezeigten Skalarfeldes, dessen Definitionsbereich die Symmetrie der  $C_{4v}$ -Gruppe besitzt, lässt sich leicht durch Anwendung der Transformationen der Symmetriegruppe auf die restringierte Funktion und anschließende gewichtete Überlagerung zurückgewinnen.

realisierbar ist. Durch Einführung eines Hilfsoperators

$$(Z\mathbf{u}_{\mathbf{R},0})(\vec{r}) := \begin{cases} \mathbf{u}_{\mathbf{R},0}(\vec{r}) & ; \quad \vec{r} \in \Omega_0 \\ 0 & ; \quad \vec{r} \in \Omega \setminus \Omega_0 \end{cases}, \quad (4.1.15)$$

welcher die restringierte Funktion auf den ursprünglichen Definitionsbereich  $\Omega$  mit dem Wert Null fortsetzt, können leicht die Symmetriekomponenten und ihre Entartungspartner unter Verwendung der Symmetrierelation in eindeutiger Weise zurückgewonnen werden:

$$\mathbf{u}_{\mathbf{R}}(\vec{r}) = (W_{\mathbf{R},0}^{-1}\mathbf{u}_{\mathbf{R},0})(\vec{r}) = \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^*[T(g)(Z\mathbf{u}_{\mathbf{R},0})](\vec{r}), \quad \vec{r} \in \Omega. \quad (4.1.16)$$

Diese Rekonstruktionsvorschrift entspricht gerade der Inversen des Restriktionsoperators, der folglich eine injektive Abbildung der invarianten Unterräume in die Räume der auf dem Fundamentalgebiet definierten Funktionen vermittelt. Weiterhin ist aus Gleichung (4.1.16) erkennbar, dass zur Rückgewinnung der Symmetriekomponenten einer Feldgröße auch die Entartungspartner der restringierten Gegenstücke zwingend erforderlich sind. Der Vorgang der Restriktion und Rekonstruktion ist in Abbildung 4.2 anhand der totalsymmetrischen Symmetriekomponente eines beispielhaft gewählten Skalarfeldes, das Element eines Darstellungsraums mit  $C_{4v}$ -Symmetrie ist, grafisch veranschaulicht. Aufgrund der Symmetrieeigenschaft dieser Komponente ist eine eindeutige Wiederherstellung aus der restringierten Funktion möglich.

Um den Raum der restringierten Funktionen, der vorerst als gesamter Wertebereich des Restriktionsoperators angenommen wird und im Allgemeinen mächtiger als sein Bildbereich ist, entsprechend einschränken zu können und damit Surjektivität zu erreichen, muss dessen Bildbereich genau analysiert werden. Es ist evident, dass durch Restriktion einer Funktion ihre Eigenschaften wie etwa Beschränktheit, Stetigkeit und Differenzierbarkeit im Inneren des reduzierten Gebietes nicht beeinflusst werden, so dass ausschließlich zum Definitionsbereich gleichartige Funktionenräume als Bildbereich in Betracht kommen. Auf

den durch die Reduktion des Rechengebietes entstehenden Schnitträndern zeigen die Funktionen ein durch die Stetigkeitseigenschaften der Symmetriekomponenten definiertes Verhalten, so dass erst durch Festlegung geeigneter Bedingungen auf den Schnitträndern des Fundamentalgebiets, die diesem Verhalten Rechnung tragen, der gesuchte Bildbereich exakt spezifiziert ist. Da diese Zwangsbedingungen von den Eigenschaften des betrachteten Funktionenraums abhängen, müssen sie für jede Problemklasse gesondert abgeleitet werden. Für die Lösung der in Differentialform gegebenen MAXWELLSchen Gleichungen bei Vorhandensein symmetrischer Strukturen werden die benötigten Schnittrandbedingungen in [96] angegeben. In dieser Arbeit steht eine spezielle Randintegralgleichungsformulierung im Vordergrund, wofür diese Bedingungen im folgenden Abschnitt systematisch hergeleitet werden.

Nachdem die Bijektivität des Restriktionsoperators hergestellt ist, kann auf dessen Grundlage der Operator  $\mathbf{L}_{\mathbf{R},0}$ , der das Problem im isomorphen Raum der restringierten Funktionen äquivalent beschreibt, formal definiert werden, indem die Kommutativität des Diagramms

$$\begin{array}{ccc}
 \mathbf{u}_{\mathbf{R}} \in \mathcal{U}_{\mathbf{R}}^{d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}}}(\Omega) & \xrightarrow{\mathcal{L}} & \mathbf{v}_{\mathbf{R}} \in \mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}}}(\Omega) \\
 \begin{array}{c} \uparrow W_{\mathbf{R},0}^{-1} \\ \downarrow W_{\mathbf{R},0} \end{array} & & \begin{array}{c} \uparrow \hat{W}_{\mathbf{R},0}^{-1} \\ \downarrow \hat{W}_{\mathbf{R},0} \end{array} \\
 \mathbf{u}_{\mathbf{R},0} \in \mathcal{U}_{\mathbf{R},0}^{d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}}}(\Omega_0) & \xrightarrow{\mathbf{L}_{\mathbf{R},0}} & \mathbf{v}_{\mathbf{R},0} \in \mathcal{V}_{\mathbf{R},0}^{d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}}}(\Omega_0)
 \end{array}$$

gefordert wird. Der transformierte Operator besitzt aufgrund der Definitionsgleichung des inversen Restriktionsoperators die Gestalt einer Matrix, die mit der Funktionenmatrix nach den üblichen Regeln der Matrizenrechnung verknüpft ist. Bei Eigenwertaufgaben repräsentieren diese Operatoren Endomorphismen, die folglich über eine Ähnlichkeitstransformation miteinander in Beziehung stehen. Dadurch stimmen ihre spektralen Eigenschaften überein, so dass auch in diesem Fall beide Probleme vollkommen gleichwertig sind.

Abschließend soll das Vorgehen bei der Reduktion eines Randwertproblems zusammengefasst werden. Unter der Annahme, dass die anfangs genannten Voraussetzungen erfüllt sind, wird im ersten Schritt das zu untersuchende lineare Randwertproblem durch eine abstrakte harmonische Analyse der Feldgrößen in voneinander unabhängige Teilprobleme, die in den Eigenräumen der Symmetriegruppe definiert sind, separiert. Eine Restriktion der Feldgrößen auf ein Fundamentalgebiet der geometrischen Struktur führt schließlich mit der Festlegung geeigneter Zwangsbedingungen auf den Schnitträndern, die von den Stetigkeitseigenschaften der betreffenden Feldgrößen abhängen, auf eine zum Ausgangsproblem äquivalente Formulierung. Aus den restringierten Symmetriesätzen der Feldlösung des transformierten Randwertproblems sind die Symmetriekomponenten bestimmbar, deren Superposition die gesuchte Gesamtlösung ergibt.

#### 4.1.4 Symmetrische Anregungen

Im vorangegangenen Unterabschnitt wurde die Separation eines Randwertproblems mit bestimmten geometrischen Symmetrieeigenschaften in mehrere Teilprobleme, die in den



simultanen Eigenräumen der Symmetriegruppe zu lösen sind, gezeigt. Dabei tritt die für nichtkommutative Gruppen typische Besonderheit auf, dass zur Bestimmung eines jeden mehrkomponentigen Symmetriesatzes ein System von Operatorgleichungen zu lösen ist. Wenn die Anregung bei derartigen Randwertaufgaben, worunter sowohl der Quellterm auf der rechten Seite von Gleichung (4.1.1a) als auch die Randwertvorgabe in Gleichung (4.1.1b) verstanden wird, keinerlei Symmetrieeigenschaften aufweist, werden im Allgemeinen alle Symmetriesätze eines jeden Typs von Null verschieden und linear unabhängig voneinander sein, so dass sämtliche Teilprobleme für die Ermittlung der Gesamtlösung heranzuziehen sind. Besitzt hingegen die Anregung irgendwelche symmetrischen Merkmale, verschwinden bestimmte Symmetriesätze der Anregung oder sind linear abhängig von Symmetriesätzen gleichen Typs. Das hat zur Folge, dass entweder die korrespondierenden Teilprobleme wegen der vorausgesetzten eindeutigen Umkehrbarkeit des Operators trivial lösbar oder zueinander ähnlich sind und demnach von vornherein außer Acht gelassen werden dürfen.

Nachfolgend sollen einfache Kriterien zur Identifikation solcher Symmetriekomponenten einer Anregung hergeleitet und die sich damit ergebenden Vereinfachungen aufgezeigt werden. Grundlegende Voraussetzung dafür ist eine sinnvolle Definition der Symmetrie von Feldern, die sich hier an dem Vorschlag von ZAGORODNOV [105] orientiert.

Sei  $G$  die Symmetriegruppe des betrachteten Systems und  $G' \subseteq G$  eine Untergruppe von  $G$ , wobei die beiden trivialen Untergruppen  $\{E\}$  und  $G$  in die Betrachtungen mit eingeschlossen sind. Eine Funktion  $u \in \mathcal{U}$  besitzt die Symmetrie der Gruppe  $G'$  vom Typ  $R'$ , wenn für alle Gruppenelemente die Gleichung

$$T(g)u = R'(g)u, \quad \forall g \in G' \subseteq G \quad (4.1.17)$$

erfüllt ist. Hierin repräsentiert  $R' = \mathbf{R}' \in \{A, B\}$  eine eindimensionale irreduzible Darstellung der Gruppe  $G'$ . Funktionen mit dieser Eigenschaft liegen im Bildraum des Projektors  $P_{\mathbf{R}'}^{(11)}$ , womit folglich alle anderen Projektoren die Funktion  $u$  auf den Nullvektor abbilden. Entspricht  $G'$  der Symmetriegruppe  $G$  des Systems, ist nur die zu diesem Symmetriotyp gehörende Anregung in Gleichung (4.1.1) von Null verschieden. Alle anderen Gleichungen sind homogen und damit trivial lösbar. Um vergleichbare Aussagen für den allgemeinen Fall, dass die Anregung die Symmetrie einer echten Untergruppe besitzt, treffen zu können, sind die Zusammenhänge zwischen den Eigenräumen der Symmetriegruppe des Systems und der Untergruppe der Anregung aufzudecken, wozu die irreduziblen Darstellungen als Konstruktionselemente der zugehörigen Projektoren herangezogen werden. Werden aus der Gruppe der irreduziblen Darstellungsmatrizen  $\mathbf{R}(g)$  der vollen Symmetriegruppe  $G$  die zu den Symmetrieelementen der Untergruppe  $G'$  gehörenden Matrizen herausgenommen, so bilden diese ebenfalls eine Darstellung der Untergruppe, die jedoch im Allgemeinen reduzibel ist oder auch äquivalent zu anderen, in derselben Weise abgeleiteten Darstellungen, sein kann. Wie jede andere Darstellung auch, ist sie nach den irreduziblen Darstellungen der Untergruppe  $\mathbf{R}'(g)$  wie folgt zerlegbar:

$$\mathbf{R}(g) \sim \sum_{\mathbf{R}' \in \mathcal{R}'}^{\oplus} m_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \mathbf{R}'(g), \quad g \in G' \subseteq G. \quad (4.1.18)$$

Analog zu Gleichung (3.2.31) lässt sich die Multiplizität aus der Orthogonalitätsbeziehung

zwischen den Charakteren einer Darstellung ableiten und ist mittels der Gleichung

$$m_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} = \frac{1}{|G'|} \sum_{g \in G'} \chi_{\mathbf{R}}(g) \chi_{\mathbf{R}'}(g^{-1}) \quad (4.1.19)$$

explizit angebbbar. Aufgrund der enormen Bedeutung für die Anwendung in der Praxis ist der in Gleichung (4.1.18) angegebene Zusammenhang für die gängigen finiten Gruppen in tabellierter Form in vielen Standardwerken zur Darstellungstheorie zu finden [93]. Für die  $C_{4v}$ -Gruppe und ihre Untergruppen ist die Korrelationstafel in Tabelle 4.1 exemplarisch gezeigt.

$C_{4v}$	$C_4$	$C_2$	$C_{2v}$ ( $\sigma_v$ )	$C_{2v}$ ( $\sigma_v C_4$ )	$C_s$ ( $\sigma_v, \sigma_v C_4^2$ )	$C_s$ ( $\sigma_v C_4, \sigma_v C_4^3$ )
$A_1$	$A$	$A$	$A_1$	$A_1$	$A'$	$A'$
$A_2$	$A$	$A$	$A_2$	$A_2$	$A''$	$A''$
$B_1$	$B$	$A$	$A_1$	$A_2$	$A'$	$A''$
$B_2$	$B$	$A$	$A_2$	$A_1$	$A''$	$A'$
$E$	$E$	$2B$	$B_1 + B_2$	$B_1 + B_2$	$A' + A''$	$A' + A''$

Tabelle 4.1: Korrelationstafel der  $C_{4v}$ -Gruppe und ihrer sämtlichen Untergruppen.

Der Wechsel zu einer anderen Basis einer mehrdimensionalen Darstellung und damit die Erzeugung eines äquivalenten Symmetriesatzes ist leicht durch eine Ähnlichkeitstransformation des Projektors

$$\mathbf{P}_{\mathbf{R}} \sim \mathbf{U} \mathbf{P}_{\mathbf{R}} \mathbf{U}^{-1} \quad (4.1.20)$$

erreichbar. Zum Erhalt der Eigenschaften des Projektors und damit zur Sicherstellung der Orthogonalität der neuen Basis ist die Transformationsmatrix  $\mathbf{U}$  unitär zu wählen. Erfolgt diese Transformation auf Grundlage derjenigen unitären Matrix, die die Darstellungen der vollen Symmetriegruppe  $G$  bezüglich der Untergruppe  $G'$  gemäß Gleichung (4.1.18) diagonalisiert, kann der Bildraum des Charakterprojektors  $P_{\mathbf{R}}$  in der gleichen Weise wie die Darstellungen als direkte Summe von Unterräumen der Bilder der Projektoren  $P_{\mathbf{R}'}$  geschrieben werden. So wird beispielsweise der totalsymmetrische Eigenraum der höheren Symmetriegruppe stets ein Unterraum des totalsymmetrischen Eigenraums der Untergruppe sein. Wegen der niedrigeren Symmetrie der Untergruppe wird es noch weitere Eigenräume der vollen Gruppe geben, die bezüglich der Untergruppe totalsymmetrisch sind. Gesucht ist jedoch umgekehrt die Zerlegung der Eigenräume der Untergruppe in die kleineren Eigenräume der höheren Symmetriegruppe. Dieser Zusammenhang lässt sich gleichermaßen aus einer derartigen Tabelle ablesen. Dazu werden sämtliche Eigenräume der Gruppe  $G$ , die zu einem bestimmten Symmetriotyp der Untergruppe  $G'$  gehören, zusammengefasst.

Zur Verdeutlichung wird die Untergruppe  $C_s$  der Gruppe  $C_{4v}$  mit  $\sigma_v$  als Spiegelebene betrachtet. Elemente eines Darstellungsraums der  $C_{4v}$ -Gruppe lassen sich in die fünf verschiedenen Symmetrietypen  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $B_1$ ,  $B_2$  und  $E$  einteilen. Dagegen zerfällt der gleiche

Darstellungsraum bei Zugrundelegung der Spiegelsymmetriegruppe  $C_s$  in einen Unterraum, der symmetrisch bezüglich der Spiegelung und damit vom Typ  $A'$  ist und einen Unterraum, der antisymmetrisch bezüglich der Spiegelung und damit vom Typ  $A''$  ist. Elemente vom Symmetriotyp  $A_1$  und  $B_1$  der  $C_{4v}$ -Gruppe und damit aus den Bildräumen der Projektoren  $P_{A_1}$  und  $P_{B_1}$  gehören beide zum gleichen Typ  $A'$  der  $C_s$ -Gruppe und liegen demzufolge im Bildraum des Projektors  $P_{A'}$ . Analoge Aussagen gelten für Elemente vom Typ  $A_2$  und  $B_2$ , die beide vom Typ  $A''$  der betrachteten Untergruppe sind. Irreduzible Darstellungsräume vom Typ  $E$  der  $C_{4v}$ -Gruppe zerfallen in zwei eindimensionale Darstellungsräume vom Typ  $A'$  und  $A''$  der  $C_s$ -Gruppe, so dass bei geeigneter Wahl der Basis Elemente aus dem Bildraum des Projektors  $P_E^{(11)}$  vom Typ  $A'$  und solche aus dem Bildraum des Projektors  $P_E^{(22)}$  vom Typ  $A''$  sind. Die Bildräume der Projektoren der Untergruppe setzen sich damit wie folgt aus denen der höheren Gruppe zusammen:

$$\mathcal{V}_{A'} = \mathcal{V}_{A_1} \oplus \mathcal{V}_{B_1} \oplus \mathcal{V}_E^{(1)}, \quad (4.1.21a)$$

$$\mathcal{V}_{A''} = \mathcal{V}_{A_2} \oplus \mathcal{V}_{B_2} \oplus \mathcal{V}_E^{(2)}. \quad (4.1.21b)$$

Weist eine Funktion die höchste Symmetrie der  $C_s$ -Gruppe vom totalsymmetrischen Typ  $A'$  auf, wird als Konsequenz daraus der antisymmetrische Anteil vom Typ  $A''$  identisch verschwinden. Für das eigentliche Problem, das die Symmetrie der  $C_{4v}$ -Gruppe besitzt, bedeutet dies, dass die Projektoren  $P_{A_2}$ ,  $P_{B_2}$  und  $P_E^{(22)}$  auf den Nullvektor abbilden. Bei mehrdimensionalen Darstellungen, wie die vom Typ  $E$ , müssen zwangsläufig auch die zugehörigen Entartungspartner verschwinden, womit dieser Symmetriesatz den Nullraum aufspannt. Damit erhalten die Funktionenmatrizen der einzelnen Symmetrietypen für den gewählten Fall die folgende Besetzungsstruktur:

$$A_1 = (\blacksquare), \quad A_2 = (\square), \quad B_1 = (\blacksquare), \quad B_2 = (\square), \quad E = \begin{pmatrix} \blacksquare & \square \\ \blacksquare & \square \end{pmatrix}. \quad (4.1.22)$$

Das Vorliegen etwaiger Symmetrien der Anregung nach der Definition (4.1.17) stellt ausschließlich eine hinreichende Bedingung für das Verschwinden bestimmter Symmetriesätze dar. Daneben können auch noch weitere Anteile nicht vorhanden sein. Dies ist beispielsweise dann der Fall, wenn es eine größere als die angenommene Untergruppe gibt, unter der die Anregung invariant ist. Prinzipiell können alle Kombinationsmöglichkeiten auftreten. Durch das vorgestellte Kriterium wird jedoch nur ein Teil davon abgedeckt.

Da gewöhnlich die Anregung in analytischer Form vorliegt, kann ihre Symmetrie bereits im Vorfeld detektiert und als zusätzliches Attribut mitgegeben werden, so dass bei der anschließenden numerischen Modellierung die Teilprobleme derjenigen Symmetrietypen, die nichts zur Gesamtlösung beitragen, a priori ausgeschlossen werden können.

Auf Grundlage der Definition in Gleichung (4.1.17) kann die Forderung konstanter Materialverteilungen zur Gewährleistung der Invarianz des gesamten elektrodynamischen Modellsystems etwas abgeschwächt werden. Hinreichend hierfür ist die Forderung der Totalsymmetrie der Materialparameter bezüglich der Gruppe  $G$  des Systems. Ist eine der Materialgrößen lediglich totalsymmetrisch bezüglich einer Untergruppe  $G'$ , so reduziert sich die maximale Symmetrie des Gesamtsystems auf die der Untergruppe.

### 4.1.5 Klassifikation von Eigenlösungen

Eine häufig anzutreffende, typische Aufgabenstellung in der angewandten Feldberechnung ist das Auffinden von Eigenfrequenzen und den zugehörigen Eigenmoden bestimmter abgeschlossener Strukturen, wie beispielsweise von Hohlraumresonatoren in der Beschleunigertechnik oder von Wellenleitern in der Hochfrequenztechnik. Von besonderem Interesse in diesem Zusammenhang ist die Problematik der Entartung eines Eigenzustandes, worunter die Frage, welche linear unabhängigen Eigenmoden zu ein und derselben Eigenfrequenz gehören, zu verstehen ist. Die maximale Anzahl dieser Moden spezifiziert den Entartungsgrad eines Zustandes und folglich die Dimension des zu dieser Eigenfrequenz gehörenden Eigenraums, der durch die entarteten Eigenmoden aufgespannt wird. Da entartete Moden nicht unterscheidbar sind, ist dieser Effekt bei vielen praktischen Anwendungen unerwünscht und wird durch ein passendes Design der Struktur vermieden.

Gewisse Ebenmäßigkeiten eines Systems, wie etwa ein periodischer Aufbau, werden sich auch im Systemverhalten, das durch seine Eigenzustände charakterisiert ist, widerspiegeln. Entartung wird hauptsächlich durch die Symmetrie eines Systems verursacht, weshalb die Gruppentheorie ein ideales Instrument zur Feststellung entarteter Eigenzustände sowie zur Quantifizierung ihres minimalen Grades ist. Letztendlich ist es möglich, die Eigenlösungen oder besser die Eigenzustände den Symmetrietypen der zugrunde liegenden Symmetriegruppe des Systems zuzuordnen und damit eine Klassifizierung vorzunehmen. Eine weitere bedeutsame Anwendung finden gruppentheoretische Methoden auch in der Störungstheorie. Wenn ein System mit einer bestimmten Symmetrie einer Störung ausgesetzt wird, kann es zu einer Reduktion der Symmetrie des Systems und damit zu einer Aufspaltung der Eigenzustände verbunden mit einer Aufhebung der Entartung kommen, die mit den aus der Darstellungstheorie bereitgestellten Mitteln erfasst und beschrieben werden kann.

Es ist zu beachten, dass das Vorhandensein einer Symmetrie nicht notwendigerweise eine Entartung der Eigenzustände mit sich bringt, sie ist höchstens ein Hinweis darauf. Umgekehrt können auch entartete Eigenzustände auftreten, ohne dass dem betrachteten System eine geometrische Symmetrie zugeschrieben werden kann.

Im Folgenden wird eine abgeschlossene, resonante Struktur betrachtet, deren höchste geometrische Symmetrie durch die Gruppe  $G$  charakterisiert ist. Zur Bestimmung der als paarweise verschieden angenommenen Eigenwerte  $\lambda_i$  dieser Anordnung sowie der zugehörigen Eigenräume

$$\mathcal{V}_\lambda = \text{span} \left\{ v_\lambda^{(j)} : j = 1, 2, \dots, d_\lambda \right\}, \quad (4.1.23)$$

die durch die linear unabhängigen Eigenvektoren  $v_\lambda^{(j)}$  aufgespannt werden, ist eine Eigenwertaufgabe, welche die allgemeine Form

$$\mathcal{L}(\lambda)v_\lambda = 0 \quad (4.1.24)$$

besitzt, zu lösen. Für  $\mathcal{L}(\lambda) = \mathcal{L}_0 - \lambda \mathcal{I}$  erhält man daraus den Spezialfall eines linearen Eigenwertproblems, hängt dagegen der Operator  $\mathcal{L}$  nichtlinear vom Parameter  $\lambda$  ab, handelt es sich um ein nichtlineares oder indirektes Eigenwertproblem. Aus der allgemeinen Formulierung in Gleichung (4.1.24) geht hervor, dass diejenigen Parameter  $\lambda$  gesucht

sind, für die der Operator  $\mathcal{L}(\lambda)$  einen nichttrivialen Kern besitzt. Es sollen die im vorherigen Abschnitt getroffenen Annahmen gelten, so dass wegen der Vertauschbarkeit des Operators  $\mathcal{L}(\lambda)$  mit allen Symmetrietransformationen gilt:

$$v_\lambda^{(j)} \in \ker\{\mathcal{L}(\lambda)\} \Rightarrow T(g)v_\lambda^{(j)} \in \ker\{\mathcal{L}(\lambda)\}, \quad \forall g \in G. \quad (4.1.25)$$

Der Kern des betrachteten Operators, der gerade dem interessierenden Eigenraum  $\mathcal{V}_\lambda$  entspricht, ist demnach selbst ein bezüglich der Gruppe  $G$  invarianter Untervektorraum und damit ein Darstellungsraum, der in irreduzible Darstellungsräume der Gruppe zerfällt:

$$\mathcal{V}_\lambda = \bigoplus_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} \bigoplus_{i=1}^{m_{\mathbf{R}}} \mathcal{E}_{\mathbf{R}}^{(i)}. \quad (4.1.26)$$

Diese Reduktionsformel impliziert, dass die Dimensionen  $d_{\mathbf{R}}$  der in der Zerlegung eines Eigenraums auftretenden irreduziblen Darstellungen untere Schranken für dessen Entartungsgrad  $d_\lambda$  sind. Da nichtkommutative Gruppen stets mehrdimensionale irreduzible Darstellungen besitzen, tritt bei Systemen mit derartigen Symmetrien zwangsläufig auch eine Entartung bestimmter Eigenzustände auf. Die Frage nach der Multiplizität  $m_{\mathbf{R}}$  und somit der Vielfachheit der irreduziblen Darstellungsräume gleichen Symmetrietyps hängt von mehreren Faktoren ab und lässt sich nicht generell beantworten. Wenn als einzige Ursache für die Entartung von Eigenzuständen eine mögliche geometrische Symmetrie angenommen wird, lässt sich gewöhnlich von der Irreduzibilität sämtlicher Eigenräume ausgehen, so dass jeder von ihnen einem einzigen Symmetriotyp der vollen Symmetriegruppe des Systems mit der Vielfachheit Eins zugeordnet werden kann. In diesem Fall liegt eine reine *Symmetrieentartung* vor. Der Entartungsgrad eines Eigenzustandes entspricht dann exakt der Dimension der irreduziblen Darstellung, nach der dieser Eigenzustand zerlegt ist. Beschreibt dagegen die angenommene Gruppe nicht die höchste Symmetrie des Systems und ist demzufolge nur eine Untergruppe der vollen Symmetriegruppe, so müssen bestimmte Darstellungen dieser Untergruppe die Basis einer irreduziblen Darstellung der höheren Symmetriegruppe bilden. Damit liegt eine Entartung infolge einer *versteckten Symmetrie* vor, wobei sich die Multiplizitäten nach der Aufspaltung der Darstellungen richten [62]. Entartungen von Eigenzuständen, die nicht durch eine geometrische Symmetrie verursacht werden, werden als *zufällig* eingestuft [62]. Als Beispiel hierzu kann ein Wellenleiter mit rechteckigem Querschnitt angeführt werden. Für bestimmte Seitenverhältnisse tritt eine Entartung bestimmter Grenzfrequenzen auf, die aber bei einer geringen Variation einer Kantenlänge ohne Änderung der Symmetrie aufgehoben wird.

Zusammenfassend bleibt festzuhalten, dass die Kenntnis der Symmetriegruppe eines Systems grundsätzlich nur einen Rückschluss auf den minimal zu erwartenden Entartungsgrad eines Eigenzustandes erlaubt. Weiterhin tritt eine symmetriebedingte Entartung nur bei Strukturen, deren volle Symmetriegruppe nichtkommutativ ist, auf.

#### 4.1.5.1 Zerlegung der Eigenräume in Symmetrietypen am Beispiel eines Wellenleiters mit quadratischem Querschnitt

Anhand der Eigenanalyse eines unendlich ausgedehnten, längshomogenen Wellenleiters mit quadratischer Querschnittsfläche, dessen Wandung aus ideal elektrisch leitfähigem

Material besteht, wird die Klassifizierung der Eigenräume nach Symmetrietypen demonstriert. Die elektromagnetischen Eigenschaften des Materials im Inneren des Wellenleiters sollen zudem als konstant angesehen werden, womit das mathematische Modell, bestehend aus den MAXWELLSchen Gleichungen, den Randbedingungen und den Materialbeziehungen, den für die Anwendung der Symmetriereduktion gestellten Anforderungen genügt.

Nach Ausnutzung der Translationssymmetrie durch Separation der axialen Abhängigkeiten resultiert ein auf die Querschnittsfläche reduziertes, zweidimensionales Eigenwertproblem, dessen Lösung die gesuchten ausbreitungsfähigen Wellen liefert. Für den hier betrachteten Rechteckhohlleiter erhält man einen unendlichen, diskreten Satz von linear unabhängigen Eigenmoden, die sich in transversal elektrische ( $TE_{mn}, m > 0 \vee n > 0$ ) und transversal magnetische ( $TM_{mn}, m > 0 \wedge n > 0$ ) Wellen aufteilen. Die analytischen Ausdrücke dafür sind in der Standardliteratur zur geführten Wellenausbreitung zu finden, weshalb hier auf deren Angabe verzichtet wird [59, 52, 56].

Typ	$m, n$ ungerade	$m, n$ gerade	$m + n$ ungerade
$A_1$	$\{TE_{mn} - TE_{nm}\}$ $\{TM_{mn} + TM_{nm}\}$		
$A_2$		$\{TE_{mn} + TE_{nm}\}$ $\{TM_{mn} - TM_{nm}\}$	
$B_1$		$\{TE_{mn} - TE_{nm}\}$ $\{TM_{mn} + TM_{nm}\}$	
$B_2$	$\{TE_{mn} + TE_{nm}\}$ $\{TM_{mn} - TM_{nm}\}$		
$E$			$\{TE_{mn}, TE_{nm}\}$ $\{TM_{mn}, TM_{nm}\}$

Tabelle 4.2: Einteilung der Eigenräume des längshomogenen Wellenleiters mit quadratischer Querschnittsfläche nach den Symmetrietypen der  $C_{4v}$ -Gruppe. Die angegebenen Eigenmoden bzw. deren Linearkombinationen konstituieren eine symmetriegerechte Basis des irreduziblen Darstellungsraums eines bestimmten Symmetrietyps dieser Gruppe.

Die höchste Symmetrie des ebenen quadratischen Rechengebiets wird durch die nicht-kommutative Gruppe  $C_{4v}$  beschrieben, die vier eindimensionale Darstellungen und eine zweidimensionale Darstellung besitzt. Folglich existieren symmetriebedingt auch Grenzfrequenzen, die mindestens zweifach entartet sind. Für eine eindeutige Typisierung der ausbreitungsfähigen Wellen bezüglich ihrer Symmetrieeigenschaften sind zunächst die ausschlaggebenden Symmetrieelemente festzustellen. Als erzeugende Elemente treten, wie in Abbildung 4.3 gezeigt, die eigentliche Drehung  $C_4$  um die vierzählige Hauptdrehachse, die in axialer Richtung durch den geometrischen Schwerpunkt der Querschnittsfläche verläuft, sowie die Spiegelung an einer, die Hauptdrehachse enthaltenen Ebene  $\sigma_v$  auf.

Bei der Analyse der Eigenräume hinsichtlich einer möglichen Entartung sind mehrere

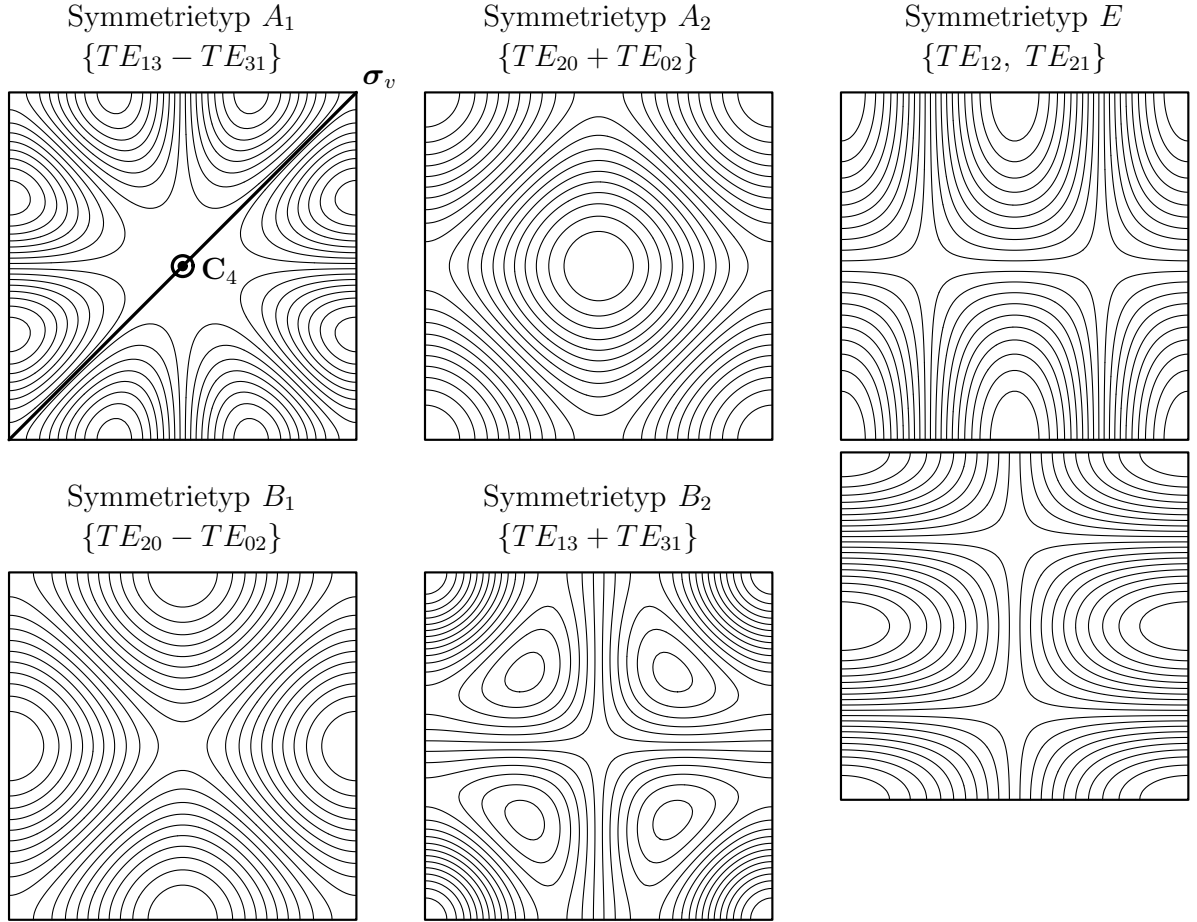


Abbildung 4.3: Elektrische Feldlinien symmetriegerechter Eigenmoden einiger ausgewählter irreduzibler Darstellungsräume der  $C_{4v}$ -Gruppe in der Querschnittsfläche eines quadratischen, längshomogenen Wellenleiters. Jeder Eigenraum dieser Anordnung zerfällt in irreduzible Darstellungsräume, die bestimmten Symmetrietypen zugeordnet sind. Aus Linearkombinationen entarteter  $TE_{mn}$ - und  $TM_{mn}$ -Eigenmoden können symmetrieadaptierte Basisfunktionen dieser Räume entwickelt werden.

Fälle zu unterscheiden. Die Paare von Eigenwellen  $\{TE_{mm}, TM_{mm}\}$  mit  $m > 0$  konstituieren Basen zweidimensionaler Eigenräume zu unterschiedlichen Eigenfrequenzen, die in eindimensionale irreduzible Darstellungsräume zerlegbar sind. Dabei spannen  $TE_{mm}$ -Moden mit geradem Index Räume vom Symmetriotyp  $A_2$  und  $TM_{mm}$ -Moden Räume vom Typ  $B_1$  auf, hingegen lassen sich  $TE_{mm}$ -Moden mit ungeradem Index dem Symmetriotyp  $B_2$  und  $TM_{mm}$ -Moden dem Typ  $A_1$  zuordnen. Ebenso bildet jeder Satz von Eigenwellen  $\{TE_{m0}, TE_{0m}\}$  mit  $m > 0$  eine Basis eines zweidimensionalen Eigenraumes. Dieser zerfällt für geraden Index in zwei eindimensionale irreduzible Darstellungsräume vom Typ  $A_2$  und  $B_1$ , die jedoch nicht von jeweils einem der beiden Eigenmoden selbst, sondern von den aus ihnen gebildeten Linearkombinationen  $TE_{m0} + TE_{0m}$  und  $TE_{m0} - TE_{0m}$  aufgespannt werden. Ist der Index ungerade, bilden die  $TE_{m0}$ - und  $TE_{0m}$ -Wellen die Basis einer zweidimensionalen Darstellung vom Typ  $E$ , womit eine reine Symmetrieentartung vorliegt. Es sei angemerkt, dass  $TE_{mn}$ - und  $TM_{mn}$ -Moden an das kartesische Koordinatensystem angepasste Eigenlösungen sind, aus denen bei Vorliegen einer Entartung beliebige neue Ba-

sen konstruierbar sind, die, wie in dem hier vorliegenden Fall, symmetrieadaptiert gewählt werden können. Aus diesem Grund ist es sinnvoll, nicht die einzelnen Eigenmoden, sondern den ausreduzierten Eigenraum, den sie aufspannen, nach den Symmetrietypen der Gruppe einzuteilen.

Die übrigen Eigenräume sind mindestens vierdimensional und werden von den Quadrupel von Eigenmoden  $\{TE_{mn}, TE_{nm}, TM_{mn}, TM_{nm}\}$  mit ungleichen, von Null verschiedenen Indizes  $m, n > 0 \wedge m \neq n$  aufgespannt. Diese Eigenräume sind weiter reduzierbar, wobei jeder irreduzible Darstellungsraum eines Symmetrietyps mindestens doppelt auftritt. Tabelle 4.2 gibt Auskunft über die Zuordnung der Eigenräume zu den Symmetrietypen sowie die Bildung symmetriegerechter Basen aus den kartesischen Eigenmoden.

In Abbildung 4.3 sind die elektrischen Feldlinien ausgewählter Vertreter der symmetrieadaptierten Basissätze eines jeden Symmetrietyps der zugrunde liegenden Gruppe in der Querschnittsfläche des Wellenleiters gezeigt. Unter Beachtung, dass sich die elektrische Feldstärke wie ein Vektor transformiert, sind die Symmetrieeigenschaften der elektromagnetischen Wellen eines bestimmten Symmetrietyps einfach daraus ablesbar. So ist leicht erkennbar, dass Moden vom Typ  $A_1$  und  $A_2$  symmetrisch bezüglich der Drehung  $C_4$  um die Hauptdrehachse sind, wohingegen Moden vom Typ  $B_1$  und  $B_2$  ihr Vorzeichen ändern und damit antisymmetrisch sind. Analog dazu lässt die Spiegelung  $\sigma_v$  Moden vom Typ  $A_1$  und  $B_1$  unverändert, hingegen ändern Moden vom Typ  $A_2$  und  $B_2$  ihr Vorzeichen bei Anwendung dieser Operation. Die Irreduzibilität der Darstellung vom Typ  $E$  wird dadurch deutlich, dass die beiden exemplarischen Basismoden sowohl bei einer Elementardrehung als auch bei einer Spiegelung ineinander transformiert werden. Abschließend seien noch einmal Moden vom Typ  $A_1$  hervorgehoben, die totalsymmetrisch und somit invariant gegenüber sämtlichen Symmetrieeoperationen dieser Gruppe sind.

#### 4.1.5.2 Aufhebung symmetriebedingter Entartung am Beispiel der Eigenräume eines quaderförmigen Hohlraumresonators

Ein aus ideal elektrisch leitfähigem Material bestehender, vollständig evakuierter, würfelförmiger Hohlraumresonator, dessen Innenabmessungen  $a = b = c = 1$  m betragen, dient als Beispiel zur Verdeutlichung der Aufspaltung von Eigenzuständen unter dem Einfluss einer Störung. Abhängig von der Symmetrie der Störung treten grundsätzlich zwei Fälle auf. Wenn die Störung die gleiche Symmetrie wie das System oder eine höhere Symmetrie als dieses besitzt, kommt es lediglich zu einer Verschiebung der Eigenfrequenzen, ohne dass sich deren Entartungsgrad ändert. Bei der hier betrachteten Anordnung kann eine derartige Störung beispielsweise durch eine kleine Variation aller Kantenlängen bei gleichbleibenden Seitenverhältnissen verursacht werden. Eine niedrigere Symmetrie der Störung im Vergleich zu der des Systems führt zu einer Aufspaltung mehrdimensionaler irreduzibler Darstellungsräume und damit zu einer teilweisen oder vollständigen Aufhebung der Entartung einer Eigenfrequenz, weil sich die Symmetrie des Systems auf die der Störung reduziert.

Die höchste Symmetrie des betrachteten Hohlraumresonators wird durch die volle Oktaedergruppe  $O_h$  beschrieben, die vier eindimensionale, zwei zweidimensionale und vier dreidimensionale irreduzible Darstellungen besitzt. Dementsprechend können die ausreduzierten Eigenräume in zehn verschiedene Symmetrietypen eingeteilt werden. Untersucht



werden soll die Auswirkung einer Störung der Geometrie durch geringfügige Änderung der Abmessungen auf das Eigenfrequenzspektrum und den zugehörigen Eigenräumen. Die dafür benötigten Zusammenhänge zwischen den Darstellungen der ursprünglichen Symmetriegruppe des Systems und der Störung können entweder einer Korrelationstafel entnommen oder mittels der im vorherigen Unterabschnitt angegebenen Reduktionsformel (4.1.18) bestimmt werden.

Grundwellen dieser Anordnung, die aus dem durch das Tripel  $\{TM_{110}, TE_{011}, TE_{101}\}$  aufgespannten dreidimensionalen Eigenraum zur kleinsten Eigenfrequenz  $f_1 = 212$  MHz stammen, sind unter Beachtung des Transformationsverhaltens der elektromagnetischen Feldgrößen vom Symmetriotyp  $T_{1u}$  und weisen demnach eine Antisymmetrie bezüglich der Inversion auf. Durch Vergrößerung einer Seitenlänge um 1% reduziert sich die Symmetrie des Resonators auf die Untergruppe  $D_{4h} \subset O_h$ , die acht eindimensionale und zwei zweidimensionale irreduzible Darstellungen besitzt. Dies hat eine Aufspaltung des Eigenraums vom Typ  $T_{1u}$  der  $O_h$ -Gruppe in einen durch das Modenpaar  $\{TE_{011}, TE_{101}\}$  aufgespannten zweidimensionalen Darstellungsraum vom Typ  $E_u$  zur Eigenfrequenz  $f'_1 = 211$  MHz und einen durch die Mode  $\{TM_{110}\}$  aufgespannten eindimensionalen Darstellungsraum vom Typ  $A_{2u}$  zur Eigenfrequenz  $f'_2 = 212$  MHz der  $D_{4h}$ -Gruppe zur Folge. Wird darüber hinaus eine der beiden gleich langen Seiten um 1% verkürzt, nimmt die Struktur die Symmetrie der Gruppe  $D_{2h} \subset D_{4h}$  an, die ausschließlich eindimensionale irreduzible Darstellungen besitzt. Daraus resultiert eine weitere Aufspaltung des Eigenraums vom Typ  $E_u$  der Gruppe  $D_{4h}$  in zwei eindimensionale Eigenräume vom Typ  $B_{2u}$  und  $B_{3u}$  der Gruppe  $D_{2h}$  zu unterschiedlichen Eigenfrequenzen  $f''_1 = 211$  MHz und  $f''_2 = 212$  MHz. Der Darstellungsraum vom Typ  $A_{2u}$  der Gruppe  $D_{4h}$  entspricht dem vom Typ  $B_{1u}$  der Gruppe  $D_{2h}$ , wobei sich die Eigenfrequenz auf den Wert  $f''_3 = 213$  MHz erhöht.

Der durch das Paar  $\{TE_{111}, TM_{111}\}$  aufgespannte zweidimensionale Eigenraum zur nächst höheren Eigenfrequenz  $f_2 = 260$  MHz des ungestörten Resonators ist irreduzibel und lässt sich dem Symmetriotyp  $E_g$  zuordnen. Eine Störung der Symmetrie führt in diesem Fall nicht zu einer Aufhebung der Entartung, sondern alleinig zu einer Verschiebung der Eigenfrequenz. Infolge der Verringerung der Symmetrie ist jedoch der Darstellungsraum reduzibel und kann in die beiden eindimensionalen Eigenräume vom Typ  $A_{1g}$  und  $B_{1g}$  der Gruppe  $D_{4h}$  zur Eigenfrequenz  $f'_3 = 259$  MHz zerlegt werden. Bei einer weiteren Reduktion der Symmetrie bleibt die Entartung erhalten, der Eigenraum zerfällt in zwei eindimensionale Darstellungen vom totalsymmetrischen Typ  $A_g$  der Gruppe  $D_{2h}$  zur Eigenfrequenz  $f''_4 = 260$  MHz.

In Abbildung 4.4 ist die Aufspaltung der ersten acht Eigenzustände des würfelförmigen Hohlraumresonators sinnbildlich dargestellt. Die Zerlegung der einzelnen Eigenräume in irreduzible Darstellungen eines bestimmten Symmetrietyps ist durch eine Summe, ihre Vielfachheit durch einen Vorfaktor symbolisiert. Zur Kennzeichnung der Dimension einer Darstellung wurde die Stärke der entsprechenden Linie, die den Eigenzustand repräsentiert, dazu proportional gewählt.

Der beschriebene Effekt lässt auch wichtige Schlüsse im Bereich der numerischen Feldberechnung zu. Die Diskretisierung einer geometrischen Struktur, die die Symmetrie einer nichtkommutativen Gruppe besitzt, führt im Allgemeinen zum Bruch der Symmetrie, so dass die approximierte Geometrie eine niedrigere Symmetriegruppe besitzt. Selbst wenn die Zerlegung in die gewählten Elementarfiguren die ursprüngliche Struktur exakt nach-

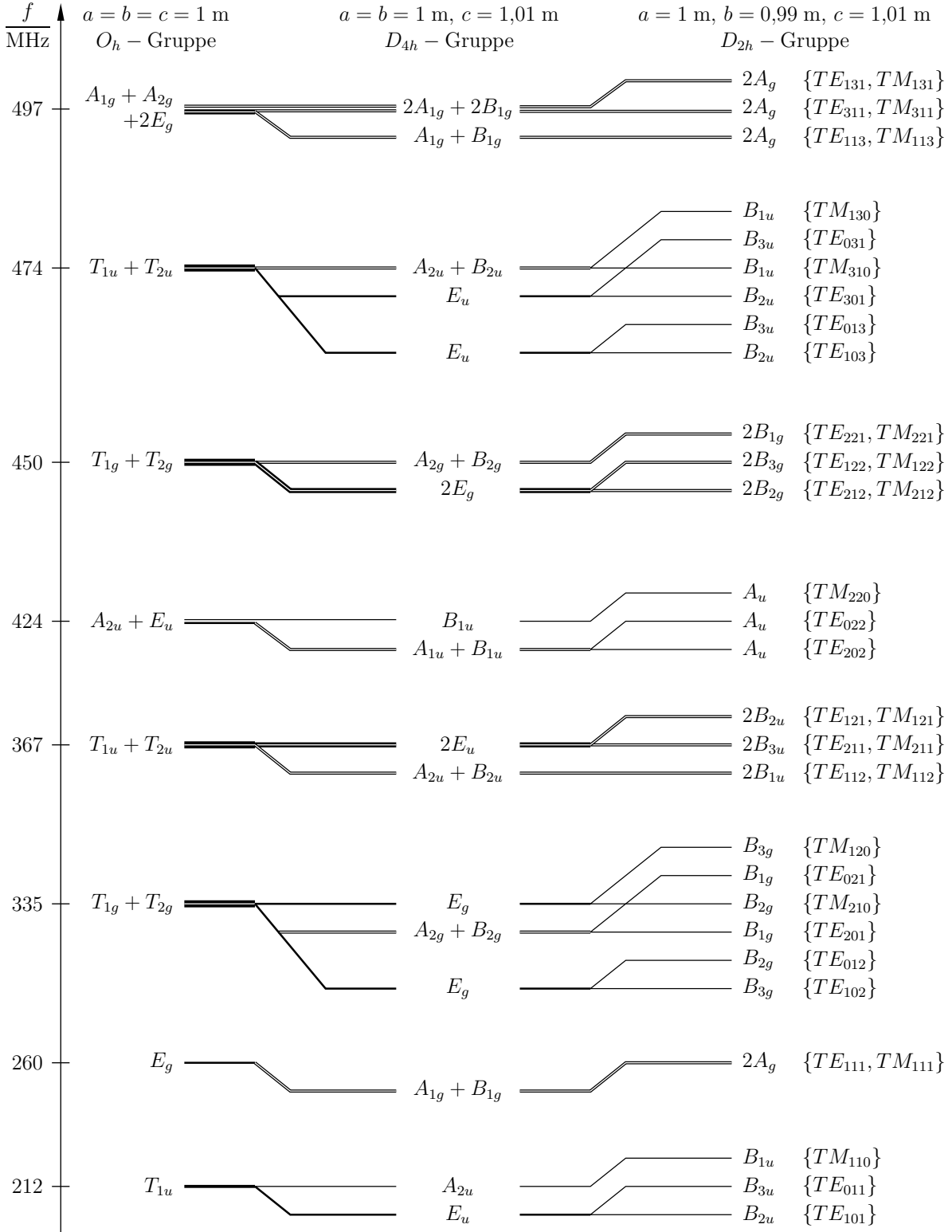


Abbildung 4.4: Aufspaltung der ersten acht Eigenfrequenzen bei Störung der Symmetrie eines würfelförmigen Resonators. Durch geringe Variation einer Kantenlänge reduziert sich die Symmetrie der Struktur, womit es zur Aufspaltung der ursprünglich irreduziblen Darstellungsräume und folglich zur Aufhebung der Entartung kommt. Jede Linie, deren Stärke proportional zur Dimension der Darstellung ist, repräsentiert einen Eigenzustand.

bildet, wie das beispielsweise bei der Diskretisierung eines Würfels in Tetraeder der Fall ist, wird deren Symmetrie bei einem unregelmäßigen Gitter gestört. Als Folge davon kommt es zur Aufspaltung der symmetrieentarteten Eigenräume des Originalproblems in die Eigenräume des diskreten Problems, welche eine niedrigere Dimension besitzen. Mit steigender Feinheit des Rechengitters nimmt der Einfluss der Störung immer weiter ab, so dass der Unterschied zwischen den aufgespaltenen Eigenfrequenzen immer geringfügiger wird. Durch eine symmetrieerhaltende Diskretisierung des Rechengebietes kann diese unerwünschte Aufspaltung der Eigenfrequenzen weitestgehend unterdrückt werden. Wesentlich eleganter und vor allem effizienter ist jedoch die Reduktion des Eigenwertproblems auf ein Fundamentalgebiet.

## 4.2 Diagonalisierung des Integraloperators

Die bisherigen, allgemein gehaltenen Ausführungen werden nachfolgend für elektromagnetische Streuprobleme mit ideal elektrisch leitfähigen Objekten

$$\mathcal{T} \underline{\vec{K}} = \vec{n} \times \underline{\vec{E}}^{\text{inc}} \quad \text{auf } S \quad (4.2.1)$$

sowie Eigenwertaufgaben homogener Hohlraumresonatoren mit der Wellenzahl  $k$  als Eigenwertparameter

$$\mathcal{T}(k) \underline{\vec{K}} = \vec{0} \quad \text{auf } S \quad (4.2.2)$$

konkretisiert, die mittels der elektrischen Feldintegralgleichung mathematisch beschrieben sein sollen. Bei der Betrachtung von ideal elektrisch leitfähigen Schirmen ist zusätzlich zu Gleichung (4.2.1) die homogene DIRICHLETSche Bedingung

$$\vec{u} \cdot \underline{\vec{K}} = 0 \quad \text{auf } \partial S \quad (4.2.3)$$

auf dem Rand  $C = \partial S$  des flächenhaften Rechengebietes  $S$  zu erfüllen, die das Verschwinden der Normalkomponente der elektrischen Flächenstromdichte  $\underline{\vec{K}}$  bezüglich der Randkurve zum Ausdruck bringt. Im Folgenden werden zuerst die erforderlichen Voraussetzungen für die Anwendbarkeit der Methode der Symmetriezellenreduktion überprüft. Anschließend erfolgt die gezielte Ableitung des reduzierten Integraloperators, um die gewünschte Problemformulierung auf dem Fundamentalgebiet zu erhalten.

Entscheidend für die Vertauschbarkeit des in Gleichung (2.2.40a) definierten Integraloperators mit den Elementen der finiten Gruppe  $G$ , die die Symmetrie des Rechengebietes  $S$  charakterisiert, ist die aus der Invarianz des euklidischen Abstandes gegenüber den Bewegungen des Ortsraums resultierende Eigenschaft der skalaren GREENSchen Freiraumfunktion

$$[T_{\vec{r}}(g)\underline{G}](\vec{r}, \vec{r}') = [T_{\vec{r}'}(g^{-1})\underline{G}](\vec{r}, \vec{r}'), \quad (4.2.4)$$

für die vereinbart werden soll, dass sie sich wie ein Skalarfeld transformiert. Eine weitere unmittelbare Konsequenz aus dem längen- und winkelerhaltenden Charakter der Symmetrieeoperatoren ist die Invarianz des differentiellen Flächenelements

$$[T(g)dA](\vec{r}) = dA(g^{-1}\vec{r}) = dA(\vec{r}). \quad (4.2.5)$$

Unter Beachtung, dass sich die Anregung in Gleichung (4.2.1) wie ein Pseudovektorfeld transformiert sowie unter Hinweis auf die Vertauschbarkeit der Randoperatoren gemäß den Gleichungen (C.2.8) im Anhang C.2 kann darauf aufbauend leicht die geforderte Äquivarianz des Integraloperators

$$\tilde{T}(g)\mathcal{T} = \mathcal{T}\vec{T}(g), \quad \forall g \in G \quad (4.2.6)$$

nachgewiesen werden. Wird zusätzlich unterstellt, dass der Definitions- und Bildbereich des Operators ein Darstellungsraum der zugrunde liegenden Symmetriegruppe ist, sind alle Voraussetzungen für die Anwendbarkeit der abstrakten harmonischen Analyse erfüllt, so dass die betrachteten Modellprobleme in den Eigenräumen der Symmetriegruppe gelöst werden können:

$$\mathcal{T} \vec{K}_R = \vec{E}_R^{\text{inc}} \quad \text{auf } S, \quad (4.2.7a)$$

$$\vec{u} \cdot \vec{K}_R = 0 \quad \text{auf } \partial S. \quad (4.2.7b)$$

Hierin bezeichnen  $\vec{K}_R = \vec{P}_R \vec{K}$  und  $\vec{E}_R^{\text{inc}} = \vec{P}_R(\vec{n} \times \vec{E}^{\text{inc}})$  Funktionenmatrizen, welche die symmetrischen Bestandteile der Flächenstromdichte und der Anregung enthalten.

### 4.2.1 Reduktion der Integraldarstellungen

Zur Bestimmung des Integraloperators im Raum der auf das Fundamentalgebiet restrinierten Funktionen sind die Integrationsgebiete aller vorkommenden Integrale durch geeignete Äquivalenzumformungen entsprechend einzuschränken. Dabei soll die Struktur der Gleichungen erhalten bleiben, so dass später bewährte Diskretisierungsstrategien ohne größere Modifikationen angewendet werden können. Um die Rechnung übersichtlich zu halten, wird dieser Schritt am Beispiel des von den Symmetriekomponenten eines Oberflächenstroms erregten Skalar- und Vektorpotentials demonstriert. Da der Integraloperator  $\mathcal{T}$  aus diesen Potentialen abgeleitet ist, können die gewonnenen Ergebnisse im Anschluss direkt auf die Integralgleichung übertragen werden. Grundlage bildet die Zerlegung des Rechengebietes gemäß Gleichung (4.1.11), die eine Aufteilung der Integrale der Form

$$\vec{A}_{R,e}^{\pm,(ij)}(\vec{r}) = \mp \sum_{g \in G} \int_{gS_0} \underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') \vec{K}_R^{(ij)}(\vec{r}') dA(\vec{r}') \quad (4.2.8)$$

mit  $\vec{K}_R^{(ij)} = \vec{P}_R^{(ij)} \vec{K}$  erlaubt. Substitution des Quellpunktes  $\vec{r}' = g\hat{\vec{r}}$  liefert unter Einbeziehung von Gleichung (4.2.4) und Gleichung (4.2.5)<sup>2</sup>

$$\begin{aligned} \vec{A}_{R,e}^{\pm,(ij)}(\vec{r}) &= \mp \sum_{g \in G} \int_{S_0} \underline{G}(g^{-1}\vec{r}, \hat{\vec{r}}) \vec{K}_R^{(ij)}(g\hat{\vec{r}}) dA(\hat{\vec{r}}) \\ &= \mp \sum_{g \in G} \int_{S_0} [\vec{T}_r(g)(\bar{I}\underline{G})](\vec{r}, \hat{\vec{r}}) [\vec{T}(g^{-1}) \vec{K}_R^{(ij)}](\hat{\vec{r}}) dA(\hat{\vec{r}}). \end{aligned} \quad (4.2.9)$$

<sup>2</sup>Die Symmetrietransformation von Dyaden ist analog zu der von Vektorfeldern definiert.

Nach Einarbeitung der Symmetrierelation und Einführung der Funktionenmatrix

$$\bar{\underline{\mathbf{G}}}_{\mathbf{R}}(\vec{r}, \vec{r}') := \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* [\vec{T}_{\vec{r}}(g)(\bar{\underline{I}}\underline{G})](\vec{r}, \vec{r}') = \frac{|G|}{d_{\mathbf{R}}} [\bar{\mathbf{P}}_{\mathbf{R}, \vec{r}}(\bar{\underline{I}}\underline{G})](\vec{r}, \vec{r}'), \quad (4.2.10)$$

deren Komponenten  $\bar{\underline{\mathbf{G}}}_{\mathbf{R}}^{(ij)} = [\bar{\underline{\mathbf{G}}}_{\mathbf{R}}]_{ij}$  als *modale dyadische GREENSche Funktionen* bezeichnet werden sollen, gelangt man schließlich zu der gewünschten Gestalt des Integrals

$$\bar{\underline{A}}_{\mathbf{R}, e}^{\pm, (ij)}(\vec{r}) = \mp \sum_{k=1}^{d_{\mathbf{R}}} \int_{S_0} \bar{\underline{\mathbf{G}}}_{\mathbf{R}}^{(ik)}(\vec{r}, \vec{r}') \bar{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{R}}^{(kj)}(\vec{r}') dA(\vec{r}'), \quad (4.2.11)$$

das nur auf einem Fundamentalgebiet auszuwerten ist. Durch Einführung einer *modalen skalaren GREENSchen Funktionenmatrix*

$$\underline{\mathbf{G}}_{\mathbf{R}}(\vec{r}, \vec{r}') := \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* [T_{\vec{r}}(g)\underline{G}](\vec{r}, \vec{r}') = \frac{|G|}{d_{\mathbf{R}}} [\mathbf{P}_{\mathbf{R}, \vec{r}}\underline{G}](\vec{r}, \vec{r}') \quad (4.2.12)$$

mit den Einträgen  $\underline{\mathbf{G}}_{\mathbf{R}}^{(ij)} = [\underline{\mathbf{G}}_{\mathbf{R}}]_{ij}$  lässt sich analog zu diesem Vorgehen die Bestimmungsgleichung für das durch die Symmetriekomponenten einer Oberflächenladung erregte Skalarpotential auf ein Fundamentalgebiet beschränken:

$$\bar{\underline{\Phi}}_{\mathbf{R}, e}^{\pm, (ij)}(\vec{r}) = \mp \frac{1}{\varepsilon} \sum_{k=1}^{d_{\mathbf{R}}} \int_{S_0} \underline{\mathbf{G}}_{\mathbf{R}}^{(ik)}(\vec{r}, \vec{r}') \underline{\sigma}_{\mathbf{R}}^{(kj)}(\vec{r}') dA(\vec{r}'). \quad (4.2.13)$$

Anzumerken ist, dass bestimmte vorteilhafte Eigenschaften der GREENSchen Freiraumfunktion, wie beispielsweise die häufig verwendete Identität in Gleichung (2.3.21), nicht für die modalen Varianten gelten, weshalb diese im Einzelfall verifiziert werden müssen.

Neben den Potentialen ist unter Hinweis auf Kapitel 2 auf den hier betrachteten Funktionenräumen die für die spätere Diskretisierung der Integralgleichungen benötigte Sesquilinearform

$$\langle \underline{\vec{f}}, \underline{\vec{g}} \rangle := \int_S \underline{\vec{f}}^* \cdot (\underline{\vec{g}} \times \vec{n}) dA \quad (4.2.14)$$

definiert, die unter der Annahme, dass sich das erste Argument wie ein Vektorfeld und das zweite wie ein Pseudovektorfeld transformiert, bereits die gewünschte Invarianz unter der Gruppe der Symmetrieeoperatoren

$$\langle \vec{T}\underline{\vec{f}}, \vec{T}\underline{\vec{g}} \rangle = \langle \underline{\vec{f}}, \underline{\vec{g}} \rangle, \quad \forall g \in G \quad (4.2.15)$$

aufweist. Unter Einbeziehung der in Abschnitt 3.3.2 festgestellten Eigenschaften der Operatormatrix  $\mathbf{P}_{\mathbf{R}}$  kann leicht gezeigt werden, dass in vollkommener Analogie zur Dekomposition von Funktionen die Sesquilinearform ebenfalls in ihre symmetrischen Komponenten gemäß

$$\langle \underline{\vec{f}}, \underline{\vec{g}} \rangle = \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} \sum_{i=1}^{d_{\mathbf{R}}} \langle \underline{\vec{f}}_{\mathbf{R}}^{(ii)}, \underline{\vec{g}}_{\mathbf{R}}^{(ii)} \rangle \quad (4.2.16)$$

zerlegbar ist. Auch hier kann die Auswertung des Integrals nach Aufteilung des Integrationsgebiets und Einarbeitung der Symmetrierelation auf ein Fundamentalgebiet beschränkt werden:

$$\langle \vec{f}_{\mathbf{R}}^{(ii)}, \vec{g}_{\mathbf{R}}^{(ii)} \rangle = \frac{|G|}{d_{\mathbf{R}}} \sum_{k=1}^{d_{\mathbf{R}}} \int_{S_0} \vec{f}_{\mathbf{R}}^{(ki)*} \cdot (\vec{g}_{\mathbf{R}}^{(ki)} \times \vec{n}) dA := \frac{|G|}{d_{\mathbf{R}}} \sum_{k=1}^{d_{\mathbf{R}}} \langle \vec{f}_{\mathbf{R}}^{(ki)}, \vec{g}_{\mathbf{R}}^{(ki)} \rangle_{S_0}. \quad (4.2.17)$$

Es wurde gezeigt, dass sowohl die elektrodynamischen Potentiale als auch die Sesquilinearform durch Integrale darstellbar sind, die sich nur über ein Fundamentalgebiet erstrecken. Die Integranden können demnach durch ihre restringierten Gegenstücke  $f_{\mathbf{R}}^{(ij)} \rightarrow f_{\mathbf{R},0}^{(ij)}$  mit  $f_{\mathbf{R},0}^{(ij)} = W_0 f_{\mathbf{R}}^{(ij)}$  ersetzt werden, ohne den Wert der Integrale selbst zu ändern.

Anstelle des Ausgangsproblems in Gleichung (4.2.1) bzw. Gleichung (4.2.2) sind  $\sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} d_{\mathbf{R}}$  unabhängige Teilprobleme reduzierter Größe zu lösen, die durch die gekoppelten  $(d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}})$  Integralgleichungssysteme

$$\sum_{k=1}^{d_{\mathbf{R}}} T_{\mathbf{R},0}^{(ik)} \vec{K}_{\mathbf{R},0}^{(kj)} = \vec{E}_{\mathbf{R},0}^{\text{inc},(ij)}, \quad \text{auf } S_0, \quad i \in [1, d_{\mathbf{R}}] \quad (4.2.18)$$

mit dem modifizierten Integraloperator

$$\begin{aligned} [T_{\mathbf{R},0}^{(ik)} \vec{K}_{\mathbf{R},0}^{(kj)}](\vec{r}) = jk_0 Z_0 \vec{n}(\vec{r}) \times & \left\{ \int_{S_0} \bar{G}_{\mathbf{R},0}^{(ik)}(\vec{r}, \vec{r}') \vec{K}_{\mathbf{R},0}^{(kj)}(\vec{r}') dA(\vec{r}') \dots \right. \\ & \left. + \frac{1}{k_0^2} \oint_{S_0} (\text{grad}_{\vec{r}} \bar{G}_{\mathbf{R},0}^{(ik)})(\vec{r}, \vec{r}') (\text{Div } \vec{K}_{\mathbf{R},0}^{(kj)})(\vec{r}') dA(\vec{r}') \right\}, \end{aligned} \quad (4.2.19)$$

dessen Kern durch die modalen GREENSchen Funktionen repräsentiert wird, beschrieben sind. Unter Beachtung, dass Teilprobleme identischen Symmetrietyps durch den gleichen Satz von Integraloperatoren modelliert werden, kann Gleichung (4.2.18) mit

$$\mathbf{T}_{\mathbf{R},0} = \tilde{W}_{\mathbf{R},0} \mathcal{T} \tilde{W}_{\mathbf{R},0}^{-1} \quad (4.2.20a)$$

$$\vec{K}_{\mathbf{R},0} = \vec{W}_{\mathbf{R},0} \vec{K}_{\mathbf{R}} \quad (4.2.20b)$$

$$\vec{E}_{\mathbf{R},0}^{\text{inc}} = \tilde{W}_{\mathbf{R},0} \vec{E}_{\mathbf{R}}^{\text{inc}} \quad (4.2.20c)$$

in der einprägsamen und leicht handhabbaren Matrixform

$$\mathbf{T}_{\mathbf{R},0} \vec{K}_{\mathbf{R},0} = \vec{E}_{\mathbf{R},0}^{\text{inc}} \quad \text{auf } S_0, \quad \mathbf{R} \in \mathcal{R} \quad (4.2.21)$$

ausgedrückt werden. Unter Verwendung der modalen GREENSchen Funktionenmatrizen lässt sich die hierin enthaltene Operatormatrix mit den restringierten modalen GREENSchen Funktionen

$$\underline{G}_{\mathbf{R},0} = W_{\mathbf{R},0} \underline{G}_{\mathbf{R}} \quad (4.2.22a)$$

$$\bar{\underline{G}}_{\mathbf{R},0} = \vec{W}_{\mathbf{R},0} \bar{\underline{G}}_{\mathbf{R}} \quad (4.2.22b)$$

explizit zu

$$[\mathbf{T}_{\mathbf{R},0} \vec{\mathbf{K}}_{\mathbf{R},0}](\vec{r}) = jk_0 Z_0 \vec{n}(\vec{r}) \times \left\{ \int_{S_0} \vec{\mathbf{G}}_{\mathbf{R},0}(\vec{r}, \vec{r}') \vec{\mathbf{K}}_{\mathbf{R},0}(\vec{r}') dA(\vec{r}') \dots \right. \\ \left. + \frac{1}{k_0^2} \int_{S_0} (\text{grad}_{\vec{r}} \vec{\mathbf{G}}_{\mathbf{R},0})(\vec{r}, \vec{r}') (\text{Div} \vec{\mathbf{K}}_{\mathbf{R},0})(\vec{r}') dA(\vec{r}') \right\} \quad (4.2.23)$$

angeben. Die Verknüpfung der GREENSchen Funktionenmatrix mit der Matrix der Randbelegung erfolgt dabei nach den bekannten Gesetzen der Matrizenrechnung, wobei das Produkt der Komponenten den herkömmlichen Verknüpfungsregeln für Funktionen unterliegt. Es ist zu beachten, dass die Komponenten der modalen GREENSchen Funktionenmatrix in Gleichung (4.2.10) im Gegensatz zur Freiraumfunktion vollbesetzte Dyaden sind, die mit der Oberflächenstromdichte in geeigneter Weise verkettet sind. In Übereinstimmung mit der Skalarmultiplikation wirken die räumlichen Differentialoperatoren komponentenweise auf die Funktionenmatrizen. Mit Blick auf Gleichung (4.2.17) lässt sich ebenso eine Sesquilinearform für die restringierten Funktionenmatrizen sinnvoll definieren, indem analog zur Addition von Matrizen diese Operation elementweise für jeweils zwei gleichgestellte Matrixeinträge ausgeführt wird

$$\left[ \left\langle \vec{\mathbf{f}}_{\mathbf{R},0}, \vec{\mathbf{g}}_{\mathbf{R},0} \right\rangle_{S_0} \right]_{ij} := \left\langle \vec{f}_{\mathbf{R},0}^{(ij)}, \vec{g}_{\mathbf{R},0}^{(ij)} \right\rangle_{S_0} = \left\langle Z \vec{f}_{\mathbf{R},0}^{(ij)}, Z \vec{g}_{\mathbf{R},0}^{(ij)} \right\rangle \quad (4.2.24)$$

und damit eine konsequente Weiterführung des Konzepts des Matrizenkalküls erlaubt.

## 4.2.2 Matrixdarstellung des Integraloperators

Formal entspricht die Transformation der auf dem Rechengebiet  $S$  definierten Integralgleichung (4.2.1) in die voneinander unabhängigen Systeme gemäß Gleichung (4.2.21), die auf einem reduzierten Gebiet auszuwerten sind, einer Diagonalisierung des Integraloperators. Zur Verdeutlichung soll die ursprüngliche Problemstellung in eine Matrixdarstellung überführt werden, wozu Gleichung (4.2.21) unter Ausnutzung der Äquivarianzeigenschaft des Integraloperators wie folgt umgeschrieben wird:

$$\sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* \underbrace{\vec{W}_{\mathbf{R},0} \vec{T}(g) \mathcal{T}}_{\mathcal{T}(g)} Z \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* \underbrace{\vec{W}_{\mathbf{R},0} \vec{T}(g) \vec{K}}_{\vec{K}(g)} = \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* \underbrace{\vec{W}_{\mathbf{R},0} \vec{T}(g) (\vec{n} \times \vec{E}^{\text{inc}})}_{\vec{E}_{\text{tan}}^{\text{inc}}(g)}. \quad (4.2.25)$$

Die hierin enthaltenen Terme  $\mathcal{T}(g)$ ,  $\vec{K}(g)$  und  $\vec{E}_{\text{tan}}^{\text{inc}}(g)$  können als Elemente einer abstrakten Gruppenalgebra über dem Raum der auf eine Symmetriezone restringierten Feldgrößen und Operatoren angesehen werden. Die auf dem gesamten Gebiet  $S$  definierten Felder stehen mit den auf dem Fundamentalgebiet  $S_0$  erklärten Teilfunktionen über die Korrespondenz

$$\vec{K}(g) = \vec{W}_0 \vec{T}(g) \vec{K} \quad \Leftrightarrow \quad \vec{K} = \sum_{g \in G} \vec{T}(g^{-1}) Z \vec{K}(g) \quad (4.2.26)$$

mit  $\vec{W}_0 := \vec{W}_{\mathbf{R},0}$  in Beziehung. Unter Hinweis auf Abschnitt 3.2.3 ist Gleichung (4.2.25) ein Resultat der verallgemeinerten FOURIER-Transformation des Faltungsprodukts

$$(\mathcal{T} \star \vec{K})(g) = \sum_{g_j \in G} \mathcal{T}(gg_j^{-1})\vec{K}(g_j) = \vec{E}_{\text{tan}}^{\text{inc}}(g), \quad \forall g \in G, \quad (4.2.27)$$

das demzufolge eine vollkommen gleichwertige Formulierung des Ausgangsproblems in Gleichung (4.2.1) darstellt.

Für den exemplarischen Fall der nichtkommutativen  $C_{3v}$ -Gruppe besitzt dieses Faltungsprodukt mit  $\sigma'_v = C_3\sigma_v$  und  $\sigma''_v = C_3^2\sigma_v$  die konkrete Matrixform

$$\begin{pmatrix} \mathcal{T}(E) & \mathcal{T}(C_3^2) & \mathcal{T}(C_3) & \mathcal{T}(\sigma_v) & \mathcal{T}(\sigma'_v) & \mathcal{T}(\sigma''_v) \\ \mathcal{T}(C_3) & \mathcal{T}(E) & \mathcal{T}(C_3^2) & \mathcal{T}(\sigma'_v) & \mathcal{T}(\sigma''_v) & \mathcal{T}(\sigma_v) \\ \mathcal{T}(C_3^2) & \mathcal{T}(C_3) & \mathcal{T}(E) & \mathcal{T}(\sigma''_v) & \mathcal{T}(\sigma_v) & \mathcal{T}(\sigma'_v) \\ \mathcal{T}(\sigma_v) & \mathcal{T}(\sigma'_v) & \mathcal{T}(\sigma''_v) & \mathcal{T}(E) & \mathcal{T}(C_3^2) & \mathcal{T}(C_3) \\ \mathcal{T}(\sigma'_v) & \mathcal{T}(\sigma''_v) & \mathcal{T}(\sigma_v) & \mathcal{T}(C_3) & \mathcal{T}(E) & \mathcal{T}(C_3^2) \\ \mathcal{T}(\sigma''_v) & \mathcal{T}(\sigma_v) & \mathcal{T}(\sigma'_v) & \mathcal{T}(C_3^2) & \mathcal{T}(C_3) & \mathcal{T}(E) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{K}(E) \\ \vec{K}(C_3) \\ \vec{K}(C_3^2) \\ \vec{K}(\sigma_v) \\ \vec{K}(\sigma'_v) \\ \vec{K}(\sigma''_v) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{E}_{\text{tan}}^{\text{inc}}(E) \\ \vec{E}_{\text{tan}}^{\text{inc}}(C_3) \\ \vec{E}_{\text{tan}}^{\text{inc}}(C_3^2) \\ \vec{E}_{\text{tan}}^{\text{inc}}(\sigma_v) \\ \vec{E}_{\text{tan}}^{\text{inc}}(\sigma'_v) \\ \vec{E}_{\text{tan}}^{\text{inc}}(\sigma''_v) \end{pmatrix}. \quad (4.2.28)$$

Durch Anwendung der abstrakten FOURIER-Transformation auf das so umformulierte Problem kann die Operatormatrix formal in eine Block-Diagonalform überführt werden

$$\begin{pmatrix} [\mathbf{T}_{A_1,0}]_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & [\mathbf{T}_{A_2,0}]_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & [\mathbf{T}_{E,0}]_{11} & [\mathbf{T}_{E,0}]_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & [\mathbf{T}_{E,0}]_{21} & [\mathbf{T}_{E,0}]_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & [\mathbf{T}_{E,0}]_{11} & [\mathbf{T}_{E,0}]_{12} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & [\mathbf{T}_{E,0}]_{21} & [\mathbf{T}_{E,0}]_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [\vec{K}_{A_1,0}]_{11} \\ [\vec{K}_{A_2,0}]_{11} \\ [\vec{K}_{E,0}]_{11} \\ [\vec{K}_{E,0}]_{21} \\ [\vec{K}_{E,0}]_{12} \\ [\vec{K}_{E,0}]_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [\vec{E}_{A_1,0}^{\text{inc}}]_{11} \\ [\vec{E}_{A_2,0}^{\text{inc}}]_{11} \\ [\vec{E}_{E,0}^{\text{inc}}]_{11} \\ [\vec{E}_{E,0}^{\text{inc}}]_{21} \\ [\vec{E}_{E,0}^{\text{inc}}]_{12} \\ [\vec{E}_{E,0}^{\text{inc}}]_{22} \end{pmatrix}, \quad (4.2.29)$$

wodurch der Vorgang der Diagonalisierung eine anschauliche Bedeutung erlangt [105]. Jede Suboperatormatrix  $\mathbf{T}_{\mathbf{R},0}$  ist  $d_{\mathbf{R}}$ -fach auf der Hauptdiagonalen vertreten, woraus sich wegen der Ähnlichkeit der beiden Operatormatrizen in Gleichung (4.2.28) und Gleichung (4.2.29) schlussfolgern lässt, dass ein Eigenwert von  $\mathbf{T}_{\mathbf{R},0}$  mindestens ein  $d_{\mathbf{R}}$ -fach entarteter Eigenwert von  $\mathcal{T}$  sein muss. Die Vereinigung der Spektren der Suboperatormatrizen  $\mathbf{T}_{\mathbf{R},0}$  bildet das Gesamtspektrum des ursprünglichen Integraloperators  $\mathcal{T}$ . Demnach weisen die transformierten Integraloperatoren ähnliche spektrale Eigenschaften wie der ursprüngliche Operator auf, was für die Auswahl der Lösungsverfahren für die diskreten Probleme von großer Wichtigkeit ist.

### 4.3 Bedingungen an den Schnittkanten

Als Ergebnis der im vorangegangenen Unterabschnitt demonstrierten Reduktion der elektrischen Feldintegralgleichung auf ein Fundamentalgebiet, die neben der Modifikation des Integralkerns auch eine Restriktion aller beteiligten Feldgrößen mit sich bringt, erhält

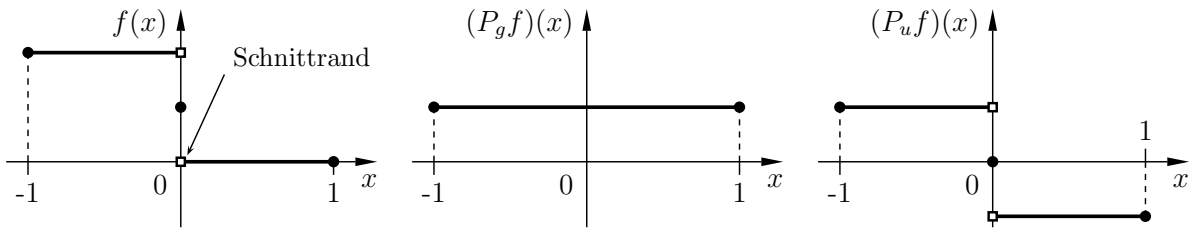


man eine neue Problemformulierung, deren Äquivalenz zum Ausgangsproblem untersucht und gegebenenfalls durch geeignete Zusatzbedingungen herbeigeführt werden muss. Gegenstand des vorliegenden Abschnitts ist die Untersuchung des Bildbereichs des Restriktionsoperators, um daraus geeignete Maßnahmen zur Erzwingung der Bijektivität dieser Abbildung ableiten zu können.

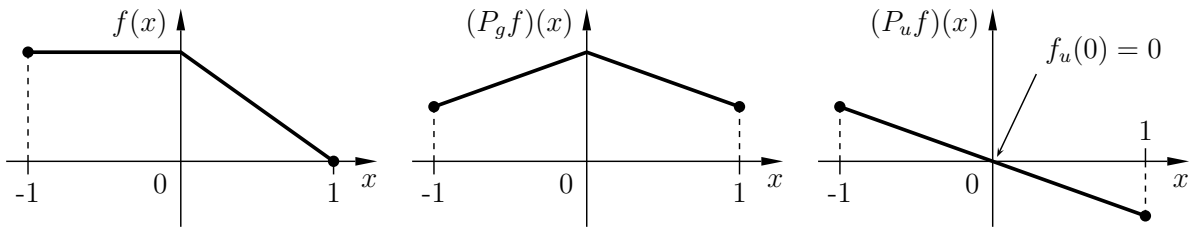
Es soll noch einmal daran erinnert werden, dass bestimmte Eigenschaften einer Funktion, wie beispielsweise Stetigkeit und Differenzierbarkeit, nicht durch eine Einschränkung des Definitionsbereichs verändert werden, so dass sich bei der Suche nach dem Bildbereich des Operators  $W_0$  auf gleichartige Funktionenräume konzentriert werden kann. Damit sind die Eigenschaften der Funktionen im Inneren des Fundamentalgebiets genau spezifiziert. Es stellt sich jedoch unweigerlich die Frage nach möglichen Zwangsbedingungen auf den durch die Reduktion des Rechengebiets entstandenen Schnittträndern, die zu einer weiteren Einschränkung der in Betracht kommenden Funktionenräume führen können. Diese Bedingungen lassen sich aus dem Verhalten der Symmetriekomponenten bei Annäherung an den Schnitttrand unter Einbeziehung ihrer Stetigkeitseigenschaften ableiten und hängen somit stark von der konkreten Problemstellung ab.

Zu Illustration dieser Problematik sind in Abbildung 4.5 exemplarisch einige, auf dem abgeschlossenen Intervall  $I = [-1, 1]$  definierte Funktionen mit unterschiedlichen Stetigkeitseigenschaften gezeigt, die aus Darstellungsräumen der Spiegelsymmetriegruppe stammen sollen. Mit der Nebenbedingung zusammenhängender Definitionsbereiche können die beiden abgeschlossenen Intervalle  $I_1 = [-1, 0]$  und  $I_2 = [0, 1]$  als einzig mögliche Fundamentalgebiete identifiziert werden. Diese Symmetriegruppe besitzt die beiden eindimensionalen, irreduziblen Darstellungen  $A_g$  und  $A_u$ , worauf sich die wohl bekannte Zerlegbarkeit einer Funktion in einen geraden und einen ungeraden Anteil begründet. Funktionen aus Räumen ohne Stetigkeitsanforderungen, wofür ein Vertreter in Abbildung 4.5a) gezeigt ist, können an beliebigen Stellen Sprünge aufweisen, weshalb auch ihre beiden Symmetriekomponenten bei Annäherung aus dem Fundamentalgebiet an den Schnitttrand  $x = 0$  jeden beliebigen Wert annehmen können. Folglich gibt es sowohl für den geraden als auch für den ungeraden Anteil keine Zwangsbedingung auf dem Schnitttrand. Wird der Funktionenraum auf den der stetigen Funktionen eingeschränkt, kann leicht geschlossen werden, dass ihre Symmetriekomponenten ungerader Parität stets einen verschwindenden Funktionswert an dem interessierenden Punkt aufweisen, wie auch in Abbildung 4.5b) zu sehen ist. Zur Sicherstellung der Stetigkeit bei der Rekonstruktion der Symmetriekomponenten muss demzufolge der ungerade Anteil einer homogenen DIRICHLETSchen Schnitttrandbedingung genügen, wohingegen für die gerade Komponente weiterhin keine Zwangsbedingung existiert. Das heißt, dass der Restriktionsoperator in diesem Fall den aus den ungeraden Funktionen gebildeten Unterraum  $\mathcal{V}_u = \{P_u f : f \in C^0(I)\}$  bijektiv auf den Raum  $\mathcal{V}_{u,0} = \{f : f \in C^0(I_1) \wedge f(0) = 0\}$  abbildet. Da der Raum der stetig differenzierbaren Funktionen ein Unterraum des der stetigen Funktionen ist, bleibt die Aussage für den ungeraden Anteil uneingeschränkt gültig. Jedoch muss jetzt zusätzlich zur Erfüllung der Forderung nach Differenzierbarkeit die gerade Komponente eine verschwindende Ableitung auf dem Schnitttrand besitzen. Dies kommt einer homogenen NEUMANNschen Schnitttrandbedingung gleich und ist in Abbildung 4.5c) verdeutlicht. Somit vermittelt der Restriktionsoperator eine bijektive Abbildung des Vektorraums  $\mathcal{V}_g = \{P_g f : f \in C^1(I)\}$  auf den Raum  $\mathcal{V}_{g,0} = \{f : f \in C^1(I_1) \wedge (df)(0) = 0\}$ .

a) unstetige Funktionen



b) stetige Funktionen,  $f \in C^0(I)$



b) stetig differenzierbare Funktionen,  $f \in C^1(I)$

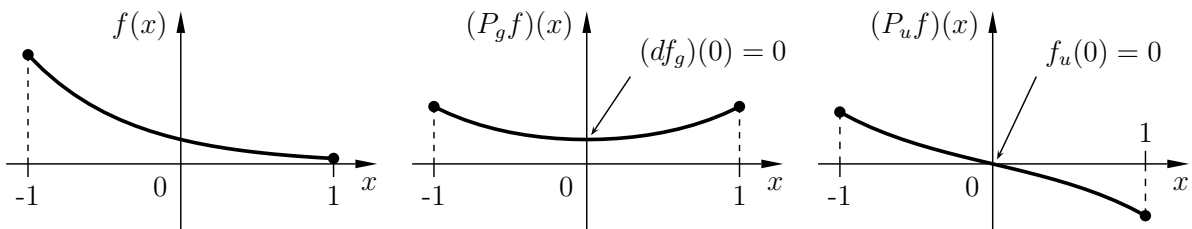


Abbildung 4.5: Bedingungen am Schnitttrand der Symmetriezelle für Funktionen mit unterschiedlichen Stetigkeitseigenschaften. Wenn sie keinen Stetigkeitsanforderungen unterliegen (a), sind von den Symmetriekomponenten keine Zwangsbedingungen bei Annäherung an den Schnitttrand zu erfüllen. Ungerade Anteile stetiger Funktionen (b) müssen der homogenen Dirichletschen Bedingung auf dem Schnitttrand genügen. Wird den Funktionen zudem stetige Differenzierbarkeit abverlangt (c), ergibt sich zusätzlich eine homogene Neumannsche Schnitttrandbedingung für die geraden Komponenten.

Für einfache Fälle, wie das einführende Beispiel, lässt eine anschauliche Herangehensweise häufig das Auffinden der erforderlichen Schnitttrandbedingungen zu. Bei der Betrachtung von Darstellungsräumen beliebiger finiter Gruppen ist jedoch eine mathematisch formale und strikte Vorgehensweise unumgänglich. Aus den bisherigen Überlegungen lässt sich schließen, dass die geforderte Stetigkeit der Normalkomponente der elektrischen Flächenstromdichte

$$\vec{u} \cdot \tau_u^+ \vec{K} = \vec{u} \cdot \tau_u^- \vec{K} = \vec{u} \cdot \vec{K}, \quad \vec{u} = \vec{t} \times \vec{n} \quad (4.3.1)$$

beim Durchgang durch eine beliebige, auf der Oberfläche verlaufende Kurve die gesuchten Bedingungen auf der Schnittkante des Fundamentalgebietes für die hier betrachteten Modellgleichungen entscheidend bestimmt. Die Orientierung der vorerst als glatt angenommenen Fläche wird durch den Normaleneinheitsvektor  $\vec{n}$ , die der ebenfalls glatten Kurve durch den Tangenteneinheitsvektor  $\vec{t}$  festgelegt. Abhängig vom Verhalten der Punkte des Schnitttrandes unter gewissen Symmetrietransformationen sind zwei mögliche Fälle zu unterscheiden, die nachfolgend getrennt analysiert und im Detail diskutiert werden.

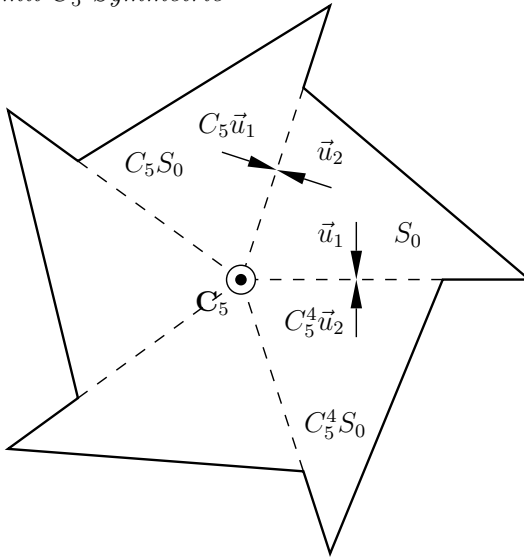
### 4.3.1 Äquivalente Punktmengen

Wenn es eine nichttriviale Symmetrietransformation  $g$  aus der Gruppe  $G$  gibt, die einen Punkt  $\vec{r}$  der Berandung des Fundamentalgebiets auf einen dazu verschiedenen Punkt  $\vec{r}' \neq \vec{r}$  des Randes abbildet, so sind diese beiden Punkte äquivalent zueinander. In Anlehnung an diese Begriffsdefinition werden die beiden Randabschnitte  $C_{\text{äqu}}$  und  $C'_{\text{äqu}}$ , die aus den Mengen der paarweise zueinander äquivalenten Punkte gebildet werden, in gleicher Weise bezeichnet

$$C_{\text{äqu}} \sim C'_{\text{äqu}} \Leftrightarrow \vec{r} \sim \vec{r}', \quad \forall \vec{r} \in C_{\text{äqu}} \wedge \forall \vec{r}' \in C'_{\text{äqu}}, \quad \text{int}\{C_{\text{äqu}} \cap C'_{\text{äqu}}\} = \emptyset. \quad (4.3.2)$$

Bei Beschränkung auf Punktgruppen tritt dieser Typ von Schnittträgern nur bei der Zerlegung von geometrischen Strukturen auf, deren Symmetrie durch die diskrete Drehgruppe  $C_n$  oder durch eine Gruppe, die aus dem direkten Produkt mit ihr gebildet wird, charakterisiert ist. Deshalb wird bei den folgenden Ausführungen ausschließlich diese Gruppe betrachtet, die abelsch ist und damit nur eindimensionale Darstellungen besitzt.

a) *geometrisches Objekt  
mit  $C_5$ -Symmetrie*



b) *ausgewähltes  
Fundamentalgebiet*

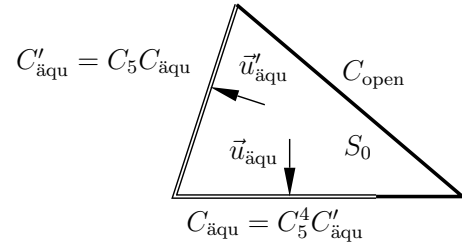


Abbildung 4.6: *Stetigkeitsbedingungen an zueinander äquivalenten Schnittkanten. Dargestellt ist die Geometrie eines infinitesimal dünnen Streuobjekts (a) mit  $C_5$ -Symmetrie sowie ein mögliches Fundamentalgebiet (b) mit Kennzeichnung der Berandung und der verwendeten Orientierung.*

In Abbildung 4.6a) ist ein flächenhaftes Gebiet als Beispiel für eine derartige Struktur gezeigt. Vereinbarungsgemäß ist der Normaleneinheitsvektor  $\vec{u}$  bezüglich der Randkurve des gewählten Fundamentalgebiets, das in Abbildung 4.6b) noch einmal isoliert dargestellt ist, nach außen gerichtet. Die Berandung  $\partial S_0$  teilt sich in ein Randstück  $C_{\text{open}}$  und den Schnitttrand  $C_{\text{cut}}$  auf, der aus den beiden zueinander äquivalenten Anteilen  $C_{\text{äqu}}$  und  $C'_{\text{äqu}}$  besteht. Da das Gesamtgebiet eindeutig durch ein Fundamentalgebiet festgelegt ist, kann auch die Orientierung der Randkurven angrenzender Teilgebiete, wie in Abbildung 4.6a) illustriert, durch die Einheitsvektoren  $\vec{u}$  des Fundamentalgebiets ausgedrückt werden.

Bezeichnet  $g$  diejenige Symmetrioperation, die den Randabschnitt  $C_{\text{äqu}}$  in den Abschnitt  $C'_{\text{äqu}} = gC_{\text{äqu}}$  transformiert, so erhält man aus der Stetigkeitsbedingung für die Normalkomponente der elektrischen Flächenstromdichte und damit auch für deren Symmetriekomponenten auf dem Randabschnitt  $C'_{\text{äqu}}$

$$[\vec{T}(g)\vec{u}_{\text{äqu}}] \cdot \vec{\underline{K}}_{\mathbf{R}} + \vec{u}'_{\text{äqu}} \cdot \vec{\underline{K}}_{\mathbf{R}} = 0 \quad (4.3.3)$$

nach einigen Äquivalenzumformungen unter Verwendung der im Anhang C.2 angegebenen Rechenregeln für die Symmetrietransformation des Punktprodukts sowie des Grenzwertoperators als Zwischenergebnis einen Ausdruck der Form

$$T(g)[\vec{u}_{\text{äqu}} \cdot \vec{T}(g^{-1})\vec{\underline{K}}_{\mathbf{R}}] + \vec{u}'_{\text{äqu}} \cdot \vec{\underline{K}}_{\mathbf{R}} = 0. \quad (4.3.4)$$

Substitution der Symmetriebeziehung (3.3.35) liefert schließlich einen Zusammenhang zwischen den Normalkomponenten der restringierten Flächenstromdichte auf diesen beiden Schnittkanten

$$\mathbf{R}(g)^* T(g)[\vec{u}_{\text{äqu}} \cdot \vec{\underline{K}}_{\mathbf{R},0}] + \vec{u}'_{\text{äqu}} \cdot \vec{\underline{K}}_{\mathbf{R},0} = 0, \quad (4.3.5)$$

der sich erwartungsgemäß auch bei Betrachtung des Randabschnittes  $C_{\text{äqu}}$  ergibt. Für das Beispielpunktproblem in Abbildung 4.6 erhält man mit  $g = C_n$  eine aussagekräftigere Darstellungsform

$$\exp\left[-j\frac{2\pi}{n}k\right] [\vec{u}_{\text{äqu}} \cdot \vec{\underline{K}}_{\mathbf{R},0}](C_n^{-1}\vec{r}) + [\vec{u}'_{\text{äqu}} \cdot \vec{\underline{K}}_{\mathbf{R},0}](\vec{r}) = 0, \quad \vec{r} \in C'_{\text{äqu}}, \quad k \in [0, n-1], \quad (4.3.6)$$

die sofort die wohl vertraute periodische Randbedingung erkennen lässt. Diese Bedingung besagt, dass der Betrag der Feldamplitude auf der Schnittkante  $C_{\text{äqu}}$  punktweise mit dem auf der Kante  $C'_{\text{äqu}}$  übereinstimmen muss, wohingegen die Phase um ein Vielfaches des Winkels einer Elementardrehung  $C_n$ , welche gerade die Abbildung zwischen den beiden äquivalenten Kanten vermittelt, verschoben ist.

### 4.3.2 Fixpunktmengen

Neben zueinander äquivalenten Randpunkten können auch Punkte auftreten, die fest unter den Symmetrietransformationen einer nichttrivialen Untergruppe  $G'$  oder sogar der Gruppe  $G$  selbst sind:

$$C_{\text{fix}} := \{\vec{r} \in C_{\text{cut}} : g\vec{r} = \vec{r}, \quad \forall g \in G' \subseteq G\}. \quad (4.3.7)$$

Randabschnitte, die aus derartigen Fixpunktmengen bestehen, sind beispielsweise bei der Spiegelsymmetriegruppe anzutreffen. Aus anschaulichen Überlegungen folgt sofort, dass eine eventuell vorhandene Fixgruppe einer Schnittkante bei Symmetriezellen von Rechengebieten, die die mathematischen Anforderungen an eine zweidimensionale Mannigfaltigkeit erfüllen, genau zwei Elemente enthalten muss. Von dieser Annahme kann auch in den meisten praktischen Anwendungsfällen, wie bei elektromagnetischen Streuproblemen mit räumlich ausgedehnten Strukturen oder Eigenwertanalysen abgeschlossener Hohlraumresonatoren, ausgegangen werden. Bei der Behandlung von Schirmproblemen sind jedoch auch flächenhafte Rechengebiete mit einer wesentlich komplizierteren Gestalt, wie beispielsweise die in Abbildung 4.7a) gezeigte Struktur mit einem Verzweigungsschnitt,

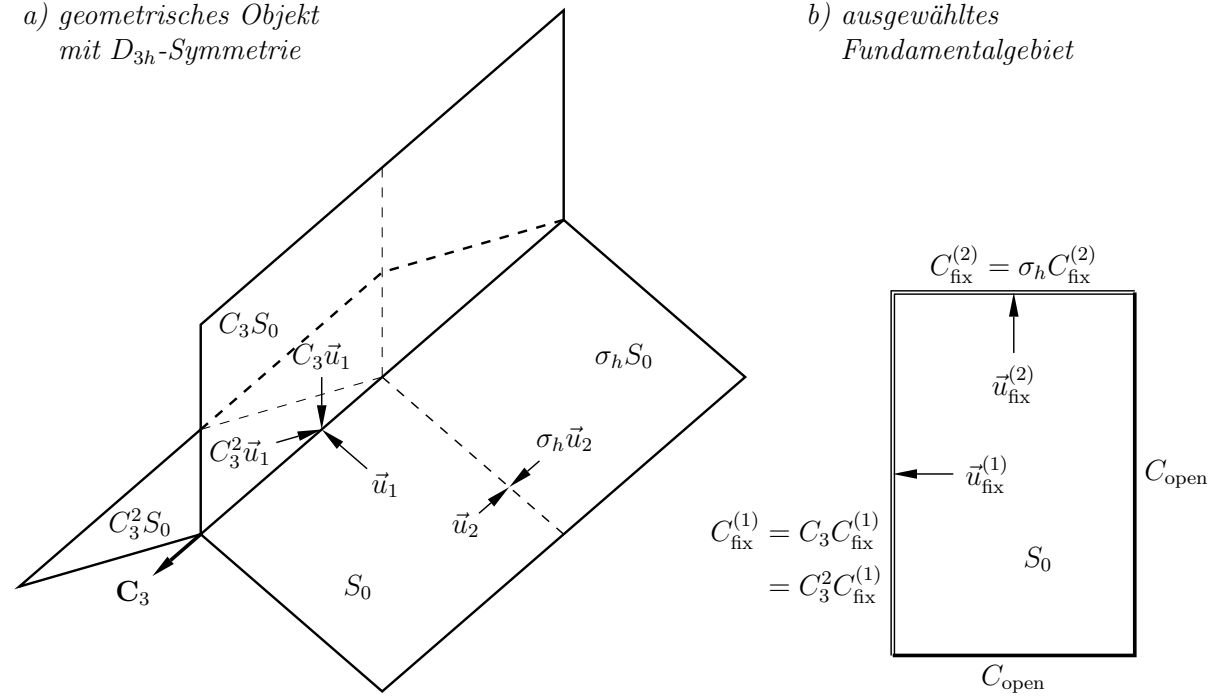


Abbildung 4.7: Stetigkeitsbedingungen an Schnittkanten, die invariant unter einer Fixgruppe sind. Dargestellt ist die Geometrie eines infinitesimal dünnen Streuobjekts (a) mit  $D_{3h}$ -Symmetrie sowie ein mögliches Fundamentalgebiet (b) mit Kennzeichnung der Berandung und der verwendeten Orientierung.

denkbar. Demzufolge kann die Ordnung der Fixgruppe auch beliebige Werte annehmen, weshalb die Ableitung der Schnitttrandbedingung für diesen Typ allgemein gehalten wird.

Um auch Flächen, die keine Mannigfaltigkeiten repräsentieren oder Knicke aufweisen, mit einbeziehen zu können, muss die Stetigkeitsbedingung für die Normalkomponente der elektrischen Flächenstromdichte, die eine unmittelbare Konsequenz aus der Kontinuitätsgleichung unter Ausschluss unphysikalischer Linienladungen ist, allgemeiner formuliert werden. Aus netzwerktheoretischer Sicht lässt sich diese Bedingung als Bilanzgleichung für Ströme, die auch als erstes KIRCHHOFFSches<sup>3</sup> Gesetz bekannt ist, auffassen, welche entlang der betrachteten Kante punktwise erfüllt sein muss. Besitzen zwei oder mehr Flächen eine gemeinsame Kante, nimmt die Stetigkeitsbedingung die allgemeine Form

$$\sum_i \vec{u}_i \cdot \tau_{u_i} \vec{K} = 0, \quad \vec{u}_i = \vec{t} \times \vec{n}_i \quad (4.3.8)$$

an. Dabei wurde vorausgesetzt, dass der Normaleneinheitsvektor  $\vec{n}_i$  des Flächenstücks  $S_i$ , der als Grenzwert bei Annäherung an die Kurve  $C_{\text{fix}}$  aus diesem Gebiet heraus zu verstehen ist, mit dem Tangenteneinheitsvektor  $\vec{t}$  von  $C_{\text{fix}}$  analog zu berandeten Flächenstücken ein Rechtssystem bildet, so dass der Vektor  $\vec{u}_i$  bezüglich  $S_i$  nach außen gerichtet ist. Die aus der Stetigkeitsforderung herrührende homogene Randbedingung in Gleichung (4.2.3)

<sup>3</sup>Gustav Robert Kirchhoff, 1824–1887, deutscher Physiker

für offene Flächenstücke sowie die auf glatten Oberflächen räumlicher Gebiete zu erfüllende Stetigkeitsbedingung in Gleichung (4.3.1) sind hierin als Sonderfälle enthalten.

In Abbildung 4.7 ist eine geometrische Figur mit  $D_{3h}$ -Symmetrie sowie ein mögliches Fundamentalgebiet gezeigt. Dessen Schnittkante setzt sich aus zwei Anteilen zusammen, wobei die Kante  $C_{\text{fix}}^{(1)}$  fix unter der Drehgruppe  $C_3$  und die Kante  $C_{\text{fix}}^{(2)}$  fix unter der Spiegelsymmetriegruppe  $C_s$  ist. Beide Gruppen sind Untergruppen der vollen Symmetriegruppe der Gesamtstruktur. Wegen der Invarianz der Punkte einer Schnittkante des hier betrachteten Typs bezüglich aller Elemente ihrer Fixgruppe gilt dies gleichwohl für die Normalkomponente der elektrischen Flächenstromdichte entlang der Schnittkante

$$T(g^{-1})[\vec{u}_i \cdot \vec{K}](\vec{r}) = [\vec{u}_i \cdot \vec{K}](g\vec{r}) = [\vec{u}_i \cdot \vec{K}](\vec{r}), \quad \vec{r} \in C_{\text{fix}}, \quad g \in G', \quad (4.3.9)$$

die das Transformationsverhalten eines Skalarfeldes aufweist. Unter Ausnutzung dieser Eigenschaft lässt sich Gleichung (4.3.8) nach Erweiterung der Summanden mit dem Einheitsoperator wie folgt umformen:

$$\sum_i T(g)T(g^{-1})\vec{u}_i \cdot \vec{K} = \sum_i T(g)[\vec{u}_i \cdot \vec{K}] = \sum_i [\vec{T}(g)\vec{u}_i] \cdot [\vec{T}(g)\vec{K}] = 0. \quad (4.3.10)$$

Die Menge der Symmetrietransformationen, welche die Einheitsvektoren  $\vec{u}_i$  auf den Einheitsvektor  $\vec{u}_{\text{fix}}$  des Randabschnittes des gewählten Fundamentalgebietes abbilden

$$\vec{T}(g)\vec{u}_i = \vec{u}_{\text{fix}}, \quad g \in G', \quad (4.3.11)$$

entspricht exakt der Fixgruppe dieser Kante  $C_{\text{fix}}$ , so dass Gleichung (4.3.8), die ebenso für die Symmetriekomponenten der Flächenstromdichte gilt, in der äquivalenten Form

$$\sum_{g \in G'} \vec{u}_{\text{fix}} \cdot [\vec{T}(g)\vec{K}_{\mathbf{R}}] = \mathbf{0} \quad (4.3.12)$$

ausgedrückt werden kann. Nach Einarbeitung der Symmetrierelation (3.3.35) nimmt diese Gleichung mit der  $(d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}})$  Matrix

$$\mathbf{B}_{\mathbf{R}} = \frac{1}{|G'|} \sum_{g \in G'} \mathbf{R}(g^{-1})^* = \frac{1}{|G'|} \sum_{g \in G'} \mathbf{R}(g)^* \quad (4.3.13)$$

die endgültige Gestalt

$$(\mathbf{B}_{\mathbf{R}} \vec{u}_{\text{fix}}) \cdot \vec{K}_{\mathbf{R},0} = \mathbf{0} \quad \text{auf } C_{\text{fix}} \quad (4.3.14)$$

an. Die Erweiterung mit dem Kehrwert der Untergruppenordnung als Vorfaktor wird sich später als sehr nützlich herausstellen.

Das so gewonnene Resultat kann als eine verallgemeinerte Form der Randbedingung mit dem Randoperator  $(\mathbf{B}_{\mathbf{R}} \vec{u}_{\text{fix}}) \cdot$  interpretiert werden, die von den Symmetriesätzen der Flächenstromdichte zu erfüllen ist. Abhängig vom konkreten Aufbau der Matrix  $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}$  tritt einer der drei folgenden Fälle auf:

- Die Bedingungsgleichung führt dazu, dass Randwerte bestimmter Elemente eines Symmetriesatzes auf dem Schnitttrand identisch verschwinden müssen. Das ist gleichbedeutend mit einer homogenen DIRICHLETSchen Randwertvorgabe für die Normalkomponente der Flächenstromdichte.

- Die Randwerte bestimmter Elemente eines Symmetriesatzes können beliebige, voneinander unabhängige Werte auf der Schnittkante annehmen und unterliegen demnach keinen Einschränkungen. Damit sind von diesen Funktionen keine Randbedingungen zu erfüllen.
- Die Randwerte bestimmter Elemente eines Symmetriesatzes können zwar von Null verschieden sein, hängen aber voneinander ab. Dieser Fall kann nur bei mehrdimensionalen Darstellungen auftreten und führt auf eine Kopplungsbedingung für diese Funktionen.

Lässt man die ersten beiden Sonderfälle außer Betracht, wird an dieser Stelle deutlich, dass die Symmetriekomponenten mit ihren Entartungspartnern nicht nur über den reduzierten Integraloperator sondern auch zusätzlich über die Randbedingung verknüpft sein können. Es versteht sich von selbst, dass sich Symmetriesätze gleichen Typs nicht in ihren Eigenschaften auf der Schnittkante unterscheiden, so dass ihre restringierten Gegenstücke dieselben Bedingungen zu erfüllen haben.

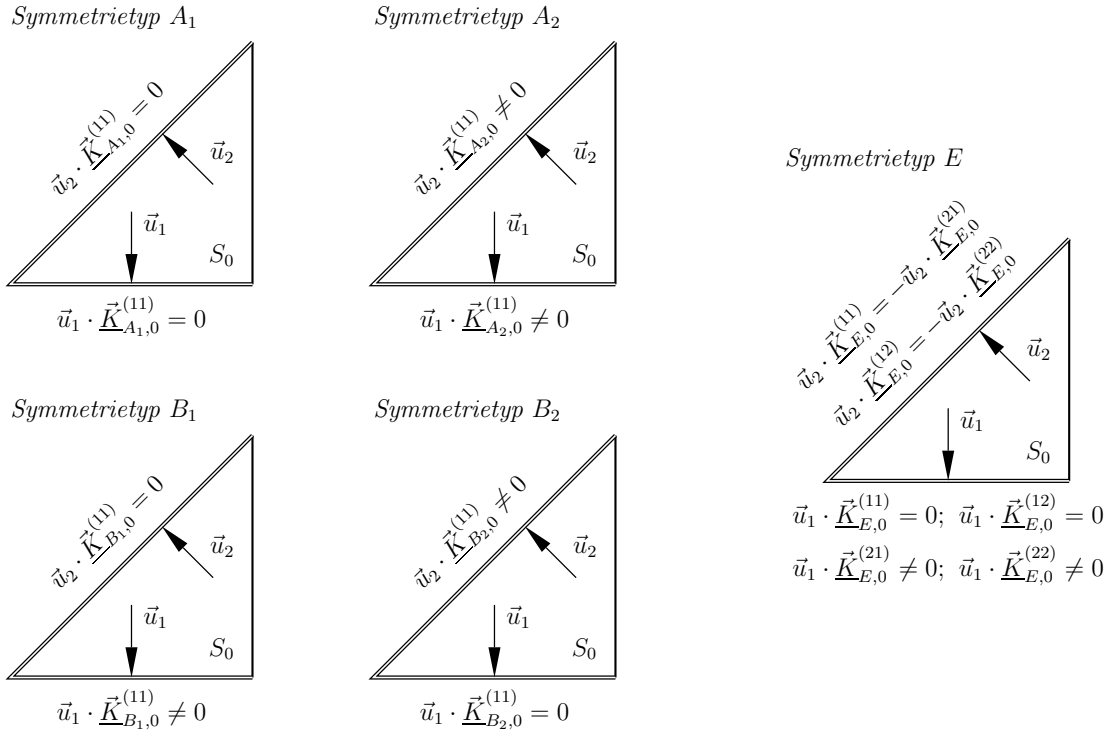


Abbildung 4.8: Schnittkantenbedingungen für die auf ein Fundamentalgebiet der quadratischen Platte reduzierte elektrische Flächenstromdichte. Bei eindimensionalen Symmetrietypen muss die Normalkomponente auf bestimmten Abschnitten homogene Randwertvorgaben erfüllen, dagegen treten beim Symmetrietyp  $E$  auch Kopplungsbedingungen zwischen den Komponenten eines restringierten Symmetriesatzes auf.

In Abbildung 4.8 sind die sich ergebenden Zwangsbedingungen, die die Normalkomponente der restringierten elektrischen Flächenstromdichte auf den Schnittkanten des Fundamentalgebiets einer geometrischen Struktur mit  $C_{4v}$ -Symmetrie erfüllen muss, illustriert.

Die Komponenten vom eindimensionalen Symmetriotyp unterliegen entweder keinen Bedingungen oder müssen der homogenen DIRICHLETSchen Randwertvorgabe genügen. Eine wesentlich kompliziertere Gestalt besitzt die Schnittkantenbedingung für Komponenten mehrdimensionaler Symmetriotypen. Neben der gezeigten Randbedingung in Form eingepprägter Vorgaben können auch Bedingungen auftreten, die die Elemente eines Symmetriesatzes miteinander koppeln.

Neben den bisher gezeigten Beispielen, in denen nur einer der beiden Typen von Schnittkantenbedingungen vorkommt, gibt es auch Fälle, in denen diese abschnittsweise auftreten. So teilt sich beispielsweise bei der  $C_{nh}$ -Gruppe, die auch im Anhang vorgestellt wird, der Schnittrand in drei Teilgebiete auf, von denen zwei zueinander äquivalent sind und das dritte fix unter der Spiegelsymmetriegruppe ist. Die hier am Beispiel der elektrischen Flächenstromdichte vorgestellte Methodik zur Deduktion der Schnittkantenbedingung aus den Stetigkeitsforderungen ist gleichermaßen für andere Feldgrößen anwendbar.

Bei Beschränkung auf Funktionen, die aus denselben Funktionenräumen wie die ursprünglichen Funktionen stammen und zusätzlich der Schnittkantenbedingung in Gleichung (4.3.5) bzw. Gleichung (4.3.14) genügen, ist das reduzierte System vollkommen gleichwertig zum ursprünglichen und kann somit an dessen Stelle gelöst werden. Bei der Betrachtung offener Flächenstücke ist zusätzlich die homogene DIRICHLETSche Bedingung auf diesem Randabschnitt, die sich durch Restriktion der Randwertvorgabe in Gleichung (4.2.7b) auf dieses Teilgebiet

$$\vec{u} \cdot \vec{K}_{\mathbf{R},0} = \mathbf{0} \quad \text{auf } C_{\text{open}} \quad (4.3.15)$$

ergibt, zu erfüllen.

Das vorliegende Resultat kann auch als gewöhnliches Randwertproblem aufgefasst werden, welches durch die elektrische Feldintegralgleichung auf einem offenen Flächenstück, das gerade dem Fundamentalgebiet entspricht, mit den sonst auch verwendeten Funktionenräumen als Definitions- und Wertebereich beschrieben ist. Im Unterschied zur herkömmlichen Formulierung wird jedoch die GREENSche Freiraumfunktion durch ihr modales Gegenstück ersetzt. Des Weiteren werden anstelle der homogenen DIRICHLETSchen Randbedingung die erarbeiteten Schnittkantenbedingungen gefordert. Hieraus wird deutlich, dass die modifizierte Feldintegralgleichung denselben Aufbau wie die ursprüngliche Gleichung besitzt, was sich für den nachfolgend behandelten Diskretisierungsprozess als unschätzbbarer Vorteil erweist.

## 4.4 Diskretisierung der reduzierten Gleichung

Als Ergebnis der Symmetriereduktion der elektrischen Feldintegralgleichung ergaben sich mehrere gekoppelte Integralgleichungssysteme, die nur auf einem Teil des ursprünglichen Rechengebiets definiert sind und vollkommen unabhängig voneinander ausgewertet werden können. Das Auffinden einer Näherungslösung dieser Systeme setzt deren Überführung in eine diskrete Form voraus, wozu die im Abschnitt 2.3 vorgestellte Momentenmethode dienen soll. Eine besondere Herausforderung stellt dabei die Wahl geeigneter Ansatz- und Testräume dar, die gewöhnlich diskrete Unterräume des Definitions- und Wertebereichs des Integraloperators sind.



Wie im kontinuierlichen Fall soll auch hier zuerst von einem zum Ausgangsproblem gleichartigen Ansatz- und Testraum mit erweiterten Basen ausgegangen werden, die die gesuchten Unterräume enthalten. Anschließend werden durch geeignete Maßnahmen diese erweiterten Räume auf Funktionen eingeschränkt, die den Schnittkantenbedingungen genügen.

Die Approximation des Fundamentalgebietes  $S_0$  erfolgt auf herkömmliche Weise durch eine Triangulierung dieses Flächenstücks, womit zugleich die Träger der noch zu spezifizierenden lokalen Basisfunktionen festgelegt sind. Prinzipiell können die voneinander unabhängigen Integralgleichungssysteme auch unterschiedlich diskretisiert werden. Um den Rechenaufwand für die Gittergenerierung möglichst gering zu halten, ist es jedoch sinnvoll, für alle Symmetrietypen ein einheitliches Gitternetz zu verwenden. In vollkommener Übereinstimmung mit der bekannten Vorgehensweise wird jede unbekannte Komponentenfunktion eines Symmetriesatzes als gewichtete Überlagerung aller Basisfunktionen  $\vec{f}_n$  mit den Koordinaten  $\underline{z}_{\mathbf{R},n}^{(kl)}$  ausgedrückt. Weiterhin werden in Anlehnung an das eingeführte Konzept der Funktionenmatrizen die Koordinaten zu  $(d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}})$  Matrizen zusammengefasst, so dass die genäherte Lösungsfunktion die kompakte Gestalt

$$\vec{\mathbf{K}}_{\mathbf{R},0} = \sum_{n=1}^N \mathbf{i}_{\mathbf{R},n} \vec{f}_n, \quad \text{mit: } [\mathbf{i}_{\mathbf{R},n}]_{kl} = \underline{z}_{\mathbf{R},n}^{(kl)} \quad (4.4.1)$$

annimmt. Dabei bezeichnet  $N$  die Gesamtzahl der Basisfunktionen und damit die Dimension des erweiterten Ansatz- und Testraums für jede Komponente des Symmetriesatzes. Mit Hilfe der in Gleichung (4.2.24) angegebenen Definition kann die Bestimmung der zur approximierten Anregung gehörenden Koordinatenmatrix mit den Elementen  $\underline{u}_{\mathbf{R},m}^{(kl)}$  ebenfalls in geschlossener Form zu

$$\underline{\mathbf{u}}_{\mathbf{R},m} = \left\langle \vec{\mathbf{F}}_m, \vec{\mathbf{E}}_{\mathbf{R},0}^{\text{inc}} \right\rangle_{S_0}, \quad \text{mit: } [\underline{\mathbf{u}}_{\mathbf{R},m}]_{kl} = \underline{u}_{\mathbf{R},m}^{(kl)}, \quad [\vec{\mathbf{F}}_m]_{kl} = \vec{f}_m \quad (4.4.2)$$

angegeben werden. Aus den bisherigen Betrachtungen ist ersichtlich, dass zwischen insgesamt drei Typen von Basisfunktionen unterschieden werden muss. Zum Zweck einer differenzierten Betrachtung wird die Indexmenge der Basisfunktionen  $\mathbb{I} = [1, N]$  in die Teilmengen  $\mathbb{I}_{\text{int}}$ ,  $\mathbb{I}_{\text{äqu}}$  und  $\mathbb{I}_{\text{fix}}$  aufgespalten. Alle Indizes von Basisfunktionen, die inneren Kanten des Gitters zugeordnet sind, bilden die Menge  $\mathbb{I}_{\text{int}}$ . Die Menge  $\mathbb{I}_{\text{äqu}}$  enthält die Indizes derjenigen Funktionen, die den beiden zueinander äquivalenten Kanten  $C'_{\text{äqu}}$  und  $C_{\text{äqu}}$  zugeordnet sind. Indizes von Funktionen, die der fixen Schnittkante angehören, werden zur Menge  $\mathbb{I}_{\text{fix}}$  zusammengefasst.

Aufgrund der bereits genannten Wahrung der Stetigkeitseigenschaften bei Restriktion der Feldgrößen auf eine Symmetriezone können den Elementarkanten im Inneren des Rechengebietes die bewährten RWG-Ansatzfunktionen

$$\vec{f}_n = \vec{f}_n^+ + \vec{f}_n^-, \quad n \in \mathbb{I}_{\text{int}} \quad (4.4.3)$$

zugeordnet werden. Auf den bei Schirmproblemen auftretenden offenen Randabschnitten muss wie beim Ausgangsproblem die Normalkomponente der elektrischen Flächenstromdichte identisch verschwinden. Dieser Forderung wird auch weiterhin dadurch Rechnung getragen, dass Elementarkanten dieses Randtyps bei der Allokation von Ansatzfunktionen ausgeschlossen werden. Zur Berücksichtigung der Bedingungen auf Schnittkanten sind jedoch spezielle Basisfunktionen erforderlich, die nachfolgend für die beiden im letzten Abschnitt diskutierten Fälle abgeleitet werden.

#### 4.4.1 Basisfunktionen für äquivalente Kanten

Da die Normalkomponente der vektorwertigen RWG-Funktionen entlang der gemeinsamen Kante von zwei Teilfunktionen einen konstanten Wert besitzt, bietet sich deren Verwendung als Basisfunktionen auf dem die Schnittkanten enthaltenen Bereich an. Damit werden die interessierenden Feldgrößen auf dem Schnittrand durch eine stückweise konstante Funktion angenähert. Um jedoch die geforderte Bedingung auf zueinander äquivalenten Kanten punktweise erfüllen zu können, müssen die Elementarkanten, in die diese zerlegt sind, ebenfalls paarweise diese Eigenschaft aufweisen. Bei der Erzeugung des Rechengitters ist demnach unbedingt auf eine konforme Diskretisierung äquivalenter Schnittränder zu achten. Ohne Beschränkung der Allgemeingültigkeit sollen die Orientierungen  $\vec{t}_k$  und  $\vec{t}_l$  eines jeden korrespondierenden Kantenpaares  $E_k$  und  $E_l$  so festgelegt werden, dass sie durch die Symmetrietransformation, die  $C_{\text{äqu}}$  auf  $C'_{\text{äqu}}$  abbildet, ineinander übergehen:

$$E_l = gE_k, \quad \vec{t}_l = \tilde{T}(g)\vec{t}_k, \quad E_k \subseteq C_{\text{äqu}}, \quad E_l \subseteq C'_{\text{äqu}}. \quad (4.4.4)$$

Jedem Paar von zueinander äquivalenten Elementarkanten wird eine Basisfunktion zugeordnet, die aus einer gewichteten Überlagerung von zwei Teilfunktionen besteht. Deren Orientierungen, die vereinbarungsgemäß durch die Flächennormalen ihrer Träger bestimmt sind, werden mit den Tangenteneinheitsvektoren der Kanten identifiziert, so dass stets zwei komplementäre Teilfunktionen  $\vec{f}_n^+$  und  $\vec{f}_n^-$  eine Ansatzfunktion bilden. Aufgrund der Freiheit einer beliebigen Normierung der Basis verbleibt ein unbekannter Koeffizient, der durch die Randbedingung in Gleichung (4.3.5), die wegen der lokalen Eigenschaften der Teilbereichsfunktionen von jeder Basisfunktion separat erfüllt sein muss, eindeutig festgelegt ist. Mit  $\vec{u}_n^\pm \cdot \vec{f}_n^\pm = \pm 1$  erhält man schließlich die für äquivalente Schnittkanten angepassten Basisfunktionen

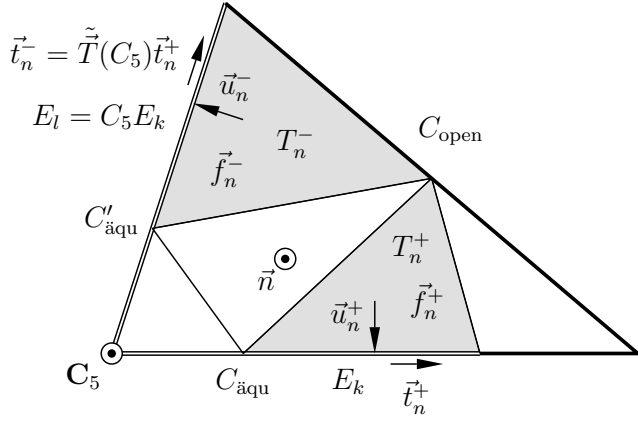
$$\vec{f}_n = \begin{cases} R(g^{-1})^* \vec{f}_n^+ + \vec{f}_n^-; & \text{für } \vec{u}_n^+ = \vec{u}_{\text{äqu}} \\ \vec{f}_n^+ + R(g^{-1})^* \vec{f}_n^-; & \text{für } \vec{u}_n^- = \vec{u}_{\text{äqu}} \end{cases}, \quad n \in \mathbb{I}_{\text{äqu}}, \quad (4.4.5)$$

die einen zu den herkömmlichen Ansatzfunktionen ähnlichen Aufbau besitzen und für das hier verwendete GALERKIN-Verfahren sowohl den Ansatz- als auch den Testraum aufspannen. In Abbildung 4.9a) ist eine derartige Basisfunktion grau hervorgehoben. Diejenige Teilfunktion, deren zugehörige Kante durch die Symmetrieoperation  $g$  auf die dazu äquivalente Kante transformiert wird, erhält somit den Phasenterm  $R(g^{-1})^*$  als Gewicht.

#### 4.4.2 Basisfunktionen für fixe Kanten

Im Gegensatz zu äquivalenten Kanten gestaltet sich die Konstruktion geeigneter Basisfunktionen für diesen Typ von Schnittkanten wesentlich komplizierter. Eine homogene DIRICHLETSche Randwertvorgabe, die auch bei Schirmproblemen vorliegt, ließe sich ebenso wie der Sonderfall, dass die Funktionswerte auf dem Rand keinen Einschränkungen unterliegen, ohne weitere Schwierigkeiten einarbeiten. Im allgemeinen Fall sind jedoch die Komponentenfunktionen eines restringierten Symmetriesatzes durch die Schnittkantenbedingung miteinander gekoppelt, weshalb ein unabhängiger Ansatz für jede Komponente

a) äquivalente Elementarkanten



b) feste Elementarkanten

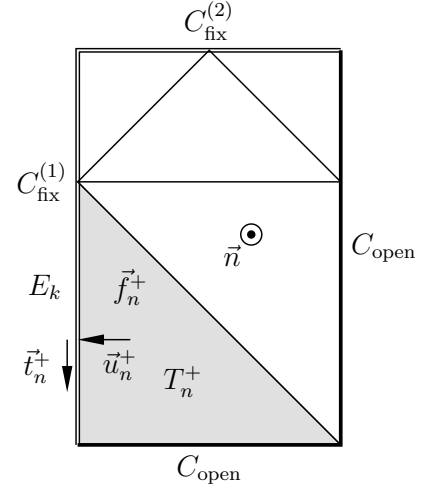


Abbildung 4.9: Konstruktion von Basisfunktionen, die den Schnittkanten zugeordnet sind. Im Fall äquivalenter Schnittkanten bilden die grau unterlegten Teilfunktionen, die zwei korrespondierenden Elementarkanten zugeordnet sind, zusammen mit einer passenden Wichtung eine Ansatzfunktion (a). Bei fixen Schnittkanten ist jeder Elementarkante eine unabhängige Teilfunktion zugeordnet (b).

ausgeschlossen ist. Aus diesem Grund wird anstelle des Aufsuchens einer an den Schnitt-  
randbedingungen angepassten Unterraumbasis eine erweiterte Basis, die einfacher zu be-  
stimmen ist und vorerst einen größeren Raum aufspannt, gewählt und anschließend die  
geforderten Zwangsbedingungen auf dem Schnitttrand eingearbeitet. Eine derartige Basis  
lässt sich dadurch erhalten, dass den Elementarkanten dieses Typs, wie in Abbildung 4.9b)  
illustriert, die Teilfunktionen

$$\vec{f}_n = \vec{f}_n^\pm, \quad n \in \mathbb{I}_{\text{fix}} \quad (4.4.6)$$

zugeordnet werden. Nach Einsetzen der Entwicklung (4.4.1) in die Schnitttrandbedingung  
(4.3.14) resultiert unter Beachtung, dass der Grenzwertprozess elementweise entlang der  
Schnittkante durchführbar ist, und mit  $\vec{u}_{\text{fix}}^\pm \cdot \vec{f}_n^\pm = \pm 1$  ein homogenes Gleichungssystem

$$\mathbf{B}_{\mathbf{R}} \mathbf{i}_{\mathbf{R},n} = \mathbf{0}, \quad n \in \mathbb{I}_{\text{fix}}, \quad (4.4.7)$$

dessen Lösung die zur Einhaltung der Schnittkantenbedingung zulässigen Koordinaten-  
werte sind. Hierin bezeichnen  $\mathbf{i}_{\mathbf{R},n}$  die Koordinatenmatrizen derjenigen Basisfunktionen,  
die der festen Schnittkante  $C_{\text{fix}}$  zugeordnet sind.

Um zu einer formalen Lösung des vorliegenden Problems zu gelangen, wird das aus den  
Koordinaten eines Symmetriesatzes gebildete  $d_{\mathbf{R}}$ -Tupel, welches einer Spalte der Matrix  
 $\mathbf{i}_{\mathbf{R},n}$  entspricht, als Element eines  $d_{\mathbf{R}}$ -dimensionalen Vektorraums  $\mathbb{C}^{d_{\mathbf{R}}}$  aufgefasst. Die  
Matrix  $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}$  konstituiert eine lineare Abbildung dieses Vektorraums in sich selbst und  
damit einen Endomorphismus. Mit Hilfe der MOORE<sup>4</sup>-PENROSE<sup>5</sup>-Pseudoinversen  $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}^\dagger$  ist  
ein Operator

$$\mathbf{P}_{\ker\{\mathbf{B}_{\mathbf{R}}\}} = \mathbf{I} - \mathbf{B}_{\mathbf{R}}^\dagger \mathbf{B}_{\mathbf{R}} \quad (4.4.8)$$

<sup>4</sup>Eliakim Hastings Moore, 1862–1932, amerikanischer Mathematiker

<sup>5</sup>Roger Penrose, \*1931, englischer Mathematiker und theoretischer Physiker

konstruierbar, der eine Orthogonalprojektion auf den Kern der Matrix  $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}$  vermittelt, womit eine formale Lösung dieses homogenen Systems erreicht wurde [81]. Zur expliziten Bestimmung der Pseudoinversen werden die sich aus dem speziellen Aufbau der Matrix  $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}$  ergebenden typischen Merkmale zweckmäßig genutzt. Da sich die Summation über die Elemente einer Gruppe erstreckt und die Summanden zudem unitäre Darstellungsmatrizen sind, folgt aus der Definitionsgleichung (4.3.13) und

$$\mathbf{B}_{\mathbf{R}}^2 = \frac{1}{|G'|} \sum_{\hat{g} \in G'} \sum_{g' \in G'} \mathbf{R}(\hat{g}^{-1} g'^{-1})^* = \frac{1}{|G'|} \sum_{\hat{g} \in G'} \sum_{g \in G'} \mathbf{R}(g^{-1})^* = \mathbf{B}_{\mathbf{R}} \quad (4.4.9)$$

sofort, dass  $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}$  hermitesch und idempotent ist. Demnach erfüllt diese Matrix selbst die definierenden Eigenschaften ihrer Pseudoinversen

$$\mathbf{B}_{\mathbf{R}}^\dagger = \mathbf{B}_{\mathbf{R}} \quad (4.4.10)$$

und leistet die Orthogonalprojektion auf ihr Bild. Als Lösung und dementsprechend als reduzierte Koordinatenmatrix ergibt sich folglich

$$\tilde{\mathbf{i}}_{\mathbf{R},n} = \mathbf{P}_{\ker\{\mathbf{B}_{\mathbf{R}}\}} \mathbf{i}_{\mathbf{R},n} = (\mathbf{I} - \mathbf{B}_{\mathbf{R}}) \mathbf{i}_{\mathbf{R},n}. \quad (4.4.11)$$

Durch die Projektion auf den Kern von  $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}$  wird der Koordinatenraum  $\mathbb{C}^{\mathbf{d}_{\mathbf{R}}}$  und damit die Zahl der möglichen Freiheitsgrade in der Ansatzfunktion so eingeschränkt, dass nur noch Funktionen darstellbar sind, die der Schnittkantenbedingung genügen. Dadurch wird diese Zwangsbedingung trotz einer erweiterten Basis des Ansatzraums implizit erfüllt. Der zur Berücksichtigung der Schnittkantenbedingung abgeleitete Operator  $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}$  stimmt mit den zur Behandlung von Fixpunkten in der algebraischen Symmetriereduktionsmethode eingesetzten Projektoren überein, womit der enge Zusammenhang zwischen diesen beiden Verfahrensweisen deutlich wird [5].

Da beim GALERKIN-Verfahren Ansatz- und Testraum übereinstimmen, erscheint es sinnvoll, die vorgestellte Strategie auch zur Festlegung einer passenden Basis für den Testraum anzuwenden. In Analogie zur Repräsentation der genäherten Flächenstromdichte werden zuerst beide Seiten der linearen Operatorgleichung formal in die gewählte Basis des erweiterten Testraums entwickelt und anschließend die sich daraus ergebenden Koordinatenmatrizen in den zulässigen Bereich mit Hilfe des Projektors  $\mathbf{P}_{\ker\{\mathbf{B}_{\mathbf{R}}\}}$  abgebildet. Bedingt durch die im Fall einer nichtorthogonalen Basis auftretenden Mischterme im Projektionsoperator  $Q_N$  wird diese Vorgehensweise gewöhnlich zu einem anderen Resultat als die unmittelbare Projektion auf einen bereits eingeschränkten Testraum führen. Letzteres ist zwar das gewünschte Ergebnis, ein derartiger Basissatz ist jedoch nur in wenigen Sonderfällen explizit bestimmbar. Anhand einfacher Beispiele kann gezeigt werden, dass die projizierten Koordinatenmatrizen bezüglich der im Abschnitt 2.3.1 angegebenen reziproken Basisfunktionen des erweiterten Ansatzraums, welche Linearkombinationen des ursprünglichen Basissatzes sind, mit den gesuchten Koordinatenmatrizen bezüglich der ebenfalls reziproken Basis des eingeschränkten Testraums übereinstimmen. Somit ergeben sich die gesuchten Koordinaten der genäherten Anregung zu:

$$\tilde{\mathbf{u}}_{\mathbf{R},m} = \mathbf{P}_{\ker\{\mathbf{B}_{\mathbf{R}}\}} \mathbf{u}_{\mathbf{R},m}. \quad (4.4.12)$$

Allerdings ist die Allgemeingültigkeit dieser Beobachtung noch zu beweisen, wozu eingehende Untersuchungen dieser Problematik notwendig sind.

### 4.4.3 Aufstellung des Gleichungssystems

Der Aufbau des linearen Gleichungssystems für jeden Symmetrietyp erfolgt auf bekannte Weise durch Einsetzen der genäherten Lösungsfunktion gemäß Gleichung (4.4.1) in die Integralgleichung und anschließende Durchführung der Testprozedur unter Verwendung des Skalarprodukts in Gleichung (4.4.2). Für eine schrittweise Herleitung sollen zunächst die Randbedingungen an fixen Schnittkanten noch unberücksichtigt bleiben. Nach einigen Äquivalenzumformungen resultiert ein  $(d_{\mathbf{R}}N \times d_{\mathbf{R}}N)$ -Gleichungssystem der Form

$$\underline{\mathbf{Z}}_{\mathbf{R}} \underline{\mathbf{I}}_{\mathbf{R}} = \underline{\mathbf{U}}_{\mathbf{R}}, \quad [\underline{\mathbf{I}}_{\mathbf{R}}]_n = \underline{\mathbf{i}}_{\mathbf{R},n}, \quad [\underline{\mathbf{U}}_{\mathbf{R}}]_m = \underline{\mathbf{u}}_{\mathbf{R},m} \quad (4.4.13)$$

mit den Blockvektoren  $\underline{\mathbf{I}}_{\mathbf{R}}$  und  $\underline{\mathbf{U}}_{\mathbf{R}}$ , die sich aus den  $(d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}})$ -Submatrizen  $\underline{\mathbf{i}}_{\mathbf{R},n}$  und  $\underline{\mathbf{u}}_{\mathbf{R},m}$  zusammensetzen. Die Einträge der Impedanzmatrix, die ebenfalls Blockgestalt besitzt, berechnen sich zu:

$$[\underline{\mathbf{Z}}_{\mathbf{R}}]_{mn} = \left\langle \vec{\mathbf{E}}_m, \mathbf{T}_{\mathbf{R},0} \vec{\mathbf{f}}_n \right\rangle_{S_0}. \quad (4.4.14)$$

Um die erforderlichen Bedingungen an den fixen Schnittkanten formal in das Gesamtsystem einzuarbeiten wird die Block-Diagonalmatrix

$$[\underline{\mathbf{\Pi}}_{\mathbf{R}}]_{mn} = \begin{cases} \mathbf{I} - \mathbf{B}_{\mathbf{R}} & ; \quad m = n \wedge m \in \mathbb{I}_{\text{fix}} \\ \mathbf{I} & ; \quad m = n \wedge m \in \mathbb{I}_{\text{int}} \cup \mathbb{I}_{\text{äqu}} \\ \mathbf{0} & ; \quad m \neq n \end{cases} \quad (4.4.15)$$

eingeführt, deren Hauptdiagonale an den entsprechenden Positionen mit den Projektoren aus Gleichung (4.4.8) besetzt ist. Anwendung dieses Projektors auf den Lösungsvektor sowie auf beide Seiten der Gleichung (4.4.13) liefert schließlich die gesuchte diskretisierte Modellgleichung im angepassten Unterraum der Koordinatenvektoren:

$$\underline{\tilde{\mathbf{Z}}}_{\mathbf{R}} \underline{\tilde{\mathbf{I}}}_{\mathbf{R}} = \underline{\tilde{\mathbf{U}}}_{\mathbf{R}}, \quad \text{mit: } \underline{\tilde{\mathbf{Z}}}_{\mathbf{R}} = \underline{\mathbf{\Pi}}_{\mathbf{R}} \underline{\mathbf{Z}}_{\mathbf{R}}, \quad \underline{\tilde{\mathbf{I}}}_{\mathbf{R}} = \underline{\mathbf{\Pi}}_{\mathbf{R}} \underline{\mathbf{I}}_{\mathbf{R}}, \quad \underline{\tilde{\mathbf{U}}}_{\mathbf{R}} = \underline{\mathbf{\Pi}}_{\mathbf{R}} \underline{\mathbf{U}}_{\mathbf{R}}. \quad (4.4.16)$$

Allerdings ist diese Formulierung für eine numerische Auswertung des diskreten Problems unzweckmäßig, da der Projektor  $\underline{\mathbf{\Pi}}_{\mathbf{R}}$  und daraus folgend auch die quadratische Impedanzmatrix  $\underline{\tilde{\mathbf{Z}}}_{\mathbf{R}}$  im Allgemeinen einen nichttrivialen Kern bezüglich des erweiterten Ansatzraums besitzen. Bei Verwendung iterativer Lösungsstrategien stößt dieser Umstand auf keine großen Schwierigkeiten, weil die in einer erzeugten Lösung enthaltenen Anteile aus dem Nullraum der Systemmatrix, der nicht zum Definitionsbereich des Lösungsvektors gehört, in einem anschließenden Projektionsschritt eliminiert werden können. Direkte Lösungsalgorithmen, die bevorzugt bei dicht besetzten Matrizen eingesetzt werden, sind hingegen nicht anwendbar, weshalb eine äquivalente Beschreibung dieses Systems im Bildbereich des Projektors  $\underline{\mathbf{\Pi}}_{\mathbf{R}}$  selbst wünschenswert ist.

Zur Ableitung einer Abbildungsvorschrift in diesen Vektorraum wird die Matrix  $\underline{\mathbf{\Pi}}_{\mathbf{R}}$  einer Spektralzerlegung unterzogen, die wegen der Block-Diagonalgestalt für jedes Hauptdiagonalelement getrennt erfolgen kann. Der interessierende Bildbereich der Idempotenten  $[\underline{\mathbf{\Pi}}_{\mathbf{R}}]_{mm}$  lässt sich sofort als Eigenraum zum Eigenwert Eins identifizieren, wofür leicht eine Basis aus einer Eigenwertanalyse oder einer Singulärwertzerlegung bestimmbar ist. Sei  $[\underline{\mathbf{Q}}_{\mathbf{R}}]_{mm}$  eine Matrix, deren Spalten eine vollständige Orthonormalbasis des Bildes von  $[\underline{\mathbf{\Pi}}_{\mathbf{R}}]_{mm}$  bilden, dann ist unter Einbeziehung der aus der vorausgesetzten Orthonormalität folgenden Unitaritätseigenschaft dieser Matrix eine faktorisierte Darstellung der Projektoren der Form

$$[\underline{\mathbf{\Pi}}_{\mathbf{R}}]_{mm} = [\underline{\mathbf{Q}}_{\mathbf{R}}]_{mm} [\underline{\mathbf{Q}}_{\mathbf{R}}]_{mm}^H \quad (4.4.17)$$

gegeben. Die Anzahl linear unabhängiger Basisvektoren, die den gesuchten Eigenraum aufspannen, entspricht der Dimension des Projektors, so dass die Matrix  $[\mathbf{Q}_\mathbf{R}]_{mm}$  aus  $d_\mathbf{R}$  Zeilen und  $d_{\mathbf{R},m} = \dim\{[\mathbf{\Pi}_\mathbf{R}]_{mm}\}$  Spalten besteht. Zu beachten ist, dass auch nulldimensionale Bildbereiche des Projektors auftreten können, was eine verschwindende Spaltenzahl bei den Transformationsmatrizen zur Folge hat. Unter Beachtung der Tatsache, dass Vektoren aus dem Bildbereich des Projektors durch diesen nicht verändert werden, folgt aus Gleichung (4.4.17) in Verbindung mit der Identität

$$[\mathbf{Q}_\mathbf{R}]_{mm}^H [\mathbf{Q}_\mathbf{R}]_{mm} = \mathbf{I}_{(d_{\mathbf{R},m} \times d_{\mathbf{R},m})}, \quad (4.4.18)$$

dass die Matrix  $[\mathbf{Q}_\mathbf{R}]_{mm}$  den Bildbereich des Projektors  $[\mathbf{\Pi}_\mathbf{R}]_{mm}$  bijektiv auf sich selbst abbildet. Analog zum Aufbau der Gesamtmatrix  $\mathbf{\Pi}_\mathbf{R}$  besitzt die Transformationsmatrix  $\mathbf{Q}_\mathbf{R}$  Block-Diagonalgestalt mit den Submatrizen in  $[\mathbf{Q}_\mathbf{R}]_{mm}$  als Hauptdiagonalelemente, so dass sie vom Typ  $(d_\mathbf{R}N \times N_\mathbf{R})$  mit

$$N_\mathbf{R} = \dim\{\mathbf{\Pi}_\mathbf{R}\} = \sum_{m=1}^N d_{\mathbf{R},m}, \quad d_{\mathbf{R},m} = \dim\{[\mathbf{\Pi}_\mathbf{R}]_{mm}\}, \quad 0 \leq d_{\mathbf{R},m} \leq d_\mathbf{R} \quad (4.4.19)$$

ist. Der geschilderte Übergang zu einer äquivalenten diskreten Problemformulierung ist im folgenden kommutativen Diagramm veranschaulicht:

$$\begin{array}{ccc} \tilde{\mathbf{I}}_\mathbf{R} \in \text{im}\{\mathbf{\Pi}_\mathbf{R}\} \subseteq \mathbb{C}^{d_\mathbf{R}N \times d_\mathbf{R}} & \xrightarrow{\hat{\mathbf{Z}}_\mathbf{R}} & \tilde{\mathbf{U}}_\mathbf{R} \in \text{im}\{\mathbf{\Pi}_\mathbf{R}\} \subseteq \mathbb{C}^{d_\mathbf{R}N \times d_\mathbf{R}} \\ \mathbf{Q}_\mathbf{R} \updownarrow \mathbf{Q}_\mathbf{R}^H & & \mathbf{Q}_\mathbf{R} \updownarrow \mathbf{Q}_\mathbf{R}^H \\ \hat{\mathbf{I}}_\mathbf{R} \in \mathbb{C}^{N_\mathbf{R} \times d_\mathbf{R}} & \xrightarrow{\hat{\mathbf{Z}}_\mathbf{R}} & \hat{\mathbf{U}}_\mathbf{R} \in \mathbb{C}^{N_\mathbf{R} \times d_\mathbf{R}} \end{array}$$

Unter Berücksichtigung, dass  $\mathbf{Q}_\mathbf{R}^H \mathbf{\Pi}_\mathbf{R} = \mathbf{Q}_\mathbf{R}^H$  gilt, nimmt die diskretisierte Integralgleichung die endgültige Gestalt

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \boxed{\phantom{d_{\mathbf{R},1} \times d_{\mathbf{R},2}}} & \boxed{d_{\mathbf{R},1} \times d_{\mathbf{R},2}} & \boxed{\phantom{d_{\mathbf{R},1} \times d_{\mathbf{R},2}}} & \dots \\ \boxed{\phantom{d_{\mathbf{R},2} \times d_{\mathbf{R},2}}} & \boxed{d_{\mathbf{R},2} \times d_{\mathbf{R},2}} & \boxed{\phantom{d_{\mathbf{R},2} \times d_{\mathbf{R},2}}} & \dots \\ \boxed{\phantom{d_{\mathbf{R},3} \times d_{\mathbf{R},2}}} & \boxed{d_{\mathbf{R},3} \times d_{\mathbf{R},2}} & \boxed{\phantom{d_{\mathbf{R},3} \times d_{\mathbf{R},2}}} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}}_{\mathbf{Q}_\mathbf{R}^H \hat{\mathbf{Z}}_\mathbf{R} \mathbf{Q}_\mathbf{R}} \underbrace{\begin{pmatrix} \boxed{d_{\mathbf{R},1} \times d_\mathbf{R}} \\ \boxed{d_{\mathbf{R},2} \times d_\mathbf{R}} \\ \boxed{d_{\mathbf{R},3} \times d_\mathbf{R}} \\ \vdots \end{pmatrix}}_{\mathbf{Q}_\mathbf{R}^H \hat{\mathbf{I}}_\mathbf{R}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \boxed{d_{\mathbf{R},1} \times d_\mathbf{R}} \\ \boxed{d_{\mathbf{R},2} \times d_\mathbf{R}} \\ \boxed{d_{\mathbf{R},3} \times d_\mathbf{R}} \\ \vdots \end{pmatrix}}_{\mathbf{Q}_\mathbf{R}^H \hat{\mathbf{U}}_\mathbf{R}} \quad (4.4.20)$$

an. Die Blockvektoren  $\hat{\mathbf{U}}_\mathbf{R} = \mathbf{Q}_\mathbf{R}^H \mathbf{U}_\mathbf{R}$  und  $\hat{\mathbf{I}}_\mathbf{R} = \mathbf{Q}_\mathbf{R}^H \mathbf{I}_\mathbf{R}$  sind aus  $N$  Submatrizen vom Typ  $(d_{\mathbf{R},m} \times d_\mathbf{R})$  aufgebaut. Die Elemente der aus  $N$  Blockzeilen und  $N$  Blockspalten bestehenden Impedanzmatrix  $\hat{\mathbf{Z}}_\mathbf{R} = \mathbf{Q}_\mathbf{R}^H \mathbf{Z}_\mathbf{R} \mathbf{Q}_\mathbf{R}$  sind demnach aus Kompatibilitätsgründen vom Typ  $(d_{\mathbf{R},m} \times d_{\mathbf{R},n})$ .

Die numerische Berechnung der Elemente des Anregungsvektors sowie der Systemmatrix kann wie gewohnt mittels Standard-Quadraturverfahren erfolgen. Da der Typ der Singularität durch die Zerlegung der GREENSchen Freiraumfunktion in ihre modalen Komponenten erhalten bleibt, sind die in Abschnitt 2.4.2 vorgestellten Regularisierungstechniken auch weiterhin uneingeschränkt einsetzbar. Analog zum kontinuierlichen Fall besitzen die Impedanzmatrizen etwas bessere Konditioneigenschaften als eine Matrix, die aus einer symmetrieerhaltenden Diskretisierung des Gesamtgebietes hervorgeht. Demnach können zur Auswertung der reduzierten Gleichungen die auch üblicherweise verwendeten Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme herangezogen werden.

Für die im nachfolgenden Abschnitt durchgeführte Untersuchung des Aufwands zur Aufstellung der Impedanzmatrizen soll Gleichung (4.4.13) in eine Darstellung überführt werden, die eine bezüglich des Rechenzeitbedarfs effizientere Implementierung erlaubt und zugleich die enge Verwandtschaft mit der algebraischen Symmetriereduktion aufzeigt. Unter Verwendung der Bestimmungsgleichung für den inversen Restriktionsoperator sowie für den Projektor können die Gleichungen (4.4.14) und (4.4.2) wie folgt umgeformt werden:

$$[\mathbf{Z}_{\mathbf{R}}]_{mn} = \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* \left\langle \vec{T}(g^{-1}) Z \vec{f}_m, \mathcal{T} \vec{f}_n \right\rangle_{g^{-1}S_0} = \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* [\mathbf{Z}(g)]_{mn}, \quad (4.4.21a)$$

$$[\mathbf{U}_{\mathbf{R}}]_m = \frac{d_{\mathbf{R}}}{|G|} \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* \left\langle \vec{T}(g^{-1}) Z \vec{f}_m, \vec{n} \times \underline{\vec{E}}^{\text{inc}} \right\rangle_{g^{-1}S_0} = \frac{d_{\mathbf{R}}}{|G|} \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* [\mathbf{u}(g)]_m. \quad (4.4.21b)$$

Die Einträge der eingeführten  $(N \times N)$ -Matrizen  $\mathbf{Z}(g)$  geben die Interaktionen zwischen den auf dem Fundamentalgebiet  $S_0$  erklärten Ansatzfunktionen  $\vec{f}_n$  und den auf das Gebiet  $g^{-1}S_0$  transformierten Testfunktionen  $\vec{f}_m$  wieder, die in ihrer Gesamtheit das ursprüngliche Rechengebiet  $S$  überdecken. Im Fall von örtlich konstanten Basisfunktionen, die Elemente aus Funktionenräumen ohne Stetigkeitsanforderungen approximieren und beispielsweise bei der Diskretisierung hypersingulärer Integralgleichungen zum Einsatz kommen [105], entspricht diese Überdeckung einer symmetrieerhaltenden Diskretisierung des Gesamtgebiets, woraus sofort folgt, dass die Matrizen  $\mathbf{Z}(g)$  eine Blockspalte der bezüglich einer geometrischen Zerlegung des Gesamtgebiets in Symmetriezellen partitionierten Impedanzmatrix bilden. Dementsprechend besteht der Anregungsvektor des diskretisierten Gesamtproblems aus den Vektoren  $\mathbf{u}(g)$  vom Typ  $(N \times 1)$ . Aufgrund der zur Erfüllung der erforderlichen Stetigkeit der Feldgrößen eingeführten modifizierten Ansatzfunktionen an den Schnittkanten gelten diese Aussagen für die hier behandelte Integralgleichungsformulierung nicht mehr. Analog zur Projektion des Gleichungssystems (4.4.13) in den Bildbereich des Projektors  $\Pi_{\mathbf{R}}$  wäre eine Modifikation der Komponenten der Matrizen  $\mathbf{Z}(g)$  notwendig, um die gewünschte Verbindung zur Systemmatrix des symmetriegerecht diskretisierten Gesamtproblems herstellen zu können.

Mit dem Lösungsvektor

$$[\mathbf{I}_{\mathbf{R}}]_n = \frac{d_{\mathbf{R}}}{|G|} \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* [\mathbf{i}(g)]_n \quad (4.4.22)$$

sowie der Definition der Verknüpfung dieser Objekte mit den irreduziblen Darstellungsmatrizen gemäß

$$[\mathbf{R}(g)^* \mathbf{Z}(g)]_{mn} := \mathbf{R}(g)^* [\mathbf{Z}(g)]_{mn}, \quad (4.4.23a)$$

$$[\mathbf{R}(g)^* \mathbf{U}(g)]_m := \mathbf{R}(g)^* [\mathbf{u}(g)]_m, \quad (4.4.23b)$$

$$[\mathbf{R}(g)^* \mathbf{I}(g)]_n := \mathbf{R}(g)^* [\mathbf{i}(g)]_n \quad (4.4.23c)$$

lässt sich das erweiterte lineare Gleichungssystem (4.4.13) in der Gestalt

$$\sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* \mathbf{Z}(g) \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* \mathbf{i}(g) = \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* \mathbf{u}(g) \quad (4.4.24)$$

ausdrücken. Werden auch hier die Vektoren  $\mathbf{i}(g)$  und  $\mathbf{u}(g)$  sowie die Matrizen  $\mathbf{Z}(g)$  als Elemente einer Gruppenalgebra aufgefasst, kann Gleichung (4.4.24) als Faltungsprodukt auf finiten Gruppen

$$(\mathbf{Z} \star \mathbf{i})(g) = \sum_{g_j \in G} \mathbf{Z}(gg_j^{-1}) \mathbf{i}(g_j) = \mathbf{u}(g), \quad \forall g \in G \quad (4.4.25)$$

formuliert werden. Der als FOURIER-Transformation auf Gruppen bezeichnete Übergang zwischen diesen beiden diskreten Darstellungen der Integralgleichung lässt in Matrixform die damit bewirkte Block-Diagonalisierung der Impedanzmatrix wiedererkennen und stimmt mit der algebraischen Symmetriereduktion überein [5].

## 4.5 Berechnung der Fernfelddaten

Zur Bestimmung der Fernfeldcharakteristik eines Streufeldes aus den Symmetriekomponenten der induzierten Oberflächenstromdichte, woraus wichtige Kenngrößen wie der Rückstreuquerschnitt des Streukörpers gewonnen werden, müssen die in Abschnitt 2.6 aufgeführten Zusammenhänge entsprechend modifiziert werden. Um analog zu den Integraloperatoren eine auf das Fundamentalgebiet beschränkte Formulierung für den Fernfeldoperator zu erhalten, muss dessen Vertauschbarkeit mit den Symmetrietransformationen gefordert werden. Da der Fernfeldoperator aus einer asymptotischen Untersuchung der integralen Darstellungsformeln für die elektromagnetischen Feldgrößen abgeleitet wurde, die die geforderte Äquivarianzeigenschaft besitzen, ist diese Voraussetzung zwangsweise erfüllt. Eine weitere wichtige Konsequenz daraus ist, dass der Kern

$$\underline{H}(\vec{r}, \vec{r}') := \exp(jk_0 Z_0 \vec{e}_r \cdot \vec{r}'), \quad \vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{\|\vec{r}\|} \quad (4.5.1)$$

des Fernfeldintegrals in Gleichung (2.6.3) dieselbe Transformationseigenschaft wie die skalare GREENSche Freiraumfunktion gemäß Gleichung (4.2.4) besitzt. Durch Einführung des modifizierten Integralkerns

$$\bar{\underline{H}}_{\mathbf{R}}(\vec{r}, \vec{r}') := \sum_{g \in G} \mathbf{R}(g)^* [\vec{T}_{\vec{r}}(g)(\bar{\underline{H}})](\vec{r}, \vec{r}'), \quad (4.5.2)$$

welcher dyadischen Charakter besitzt, kann die Repräsentation der einzelnen Symmetriesätze der Fernfeldcharakteristik

$$(\mathbf{F}_{\mathbf{R},0} \vec{\mathbf{K}}_{\mathbf{R},0})(\vec{r}) = jk_0 Z_0 \vec{e}_r \times \int_{S_0} \bar{\underline{H}}_{\mathbf{R}}(\vec{r}, \vec{r}') \vec{\mathbf{K}}_{\mathbf{R},0}(\vec{r}') dA(\vec{r}'), \quad \vec{r} = \vec{r}(\vartheta, \varphi) \quad (4.5.3)$$



in einer zur Ausgangsdarstellung strukturgleichen Form ausgedrückt werden. Die Überlagerung sämtlicher Symmetriekomponenten

$$\mathcal{F} \vec{\underline{K}} = \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} \text{tr} \left\{ \mathbf{F}_{\mathbf{R},0} \vec{\underline{K}}_{\mathbf{R},0} \right\} \quad (4.5.4)$$

liefert das gesamte Fernfeld.

An die Stelle der skalarwertigen Einträge in den diskreten Fernfeldoperatoren gemäß Gleichung (2.6.10) treten die  $(d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R},n})$ -Submatrizen

$$\left[ \hat{\underline{\mathbf{F}}}_{\mathbf{R},\vartheta/\varphi} \right]_{mn} = (\vec{e}_{\vartheta/\varphi} \cdot \mathbf{F}_{\mathbf{R},0} \vec{f}_n [\mathbf{Q}_{\mathbf{R}}]_{nn}) (\vartheta_m, \varphi_m). \quad (4.5.5)$$

Auch im diskreten Fall erhält man die Fernfelddaten aus der Superposition der Symmetriekomponenten, so dass für die Einträge der Fernfeldvektoren abschließend folgt:

$$[\underline{\mathbf{F}}_{\vartheta/\varphi} \underline{\mathbf{i}}]_n = \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} \text{tr} \left\{ \left[ \hat{\underline{\mathbf{F}}}_{\mathbf{R},\vartheta/\varphi} \hat{\underline{\mathbf{I}}}_{\mathbf{R}} \right]_n \right\}. \quad (4.5.6)$$

## 4.6 Aufwandsabschätzung

Bedingt durch die Zerlegung des Gesamtproblems in mehrere, voneinander unabhängige Teilprobleme reduzierter Größe ist sowohl ein Vorteil im Speicherbedarf als auch im Rechenaufwand bei der Lösung des diskreten Problems auf einer Rechenanlage zu erwarten. Zwar wird dadurch die asymptotische Komplexitätsordnung der eingesetzten numerischen Verfahren nicht herabgesetzt, der Aufwand verringert sich jedoch um einen, von der Symmetrie des zu untersuchenden Systems abhängigen Faktor, für den im Folgenden eine Abschätzung angegeben werden soll. Neben der Auswertung des Gleichungssystems besitzt auch die Erzeugung der Impedanzmatrix wegen ihrer dichten Besetzungsstruktur einen nicht unerheblichen Anteil an der Gesamtrechnenzeit. Alle anderen Prozessschritte, wie Gittergenerierung, Aufstellung des Anregungsvektors und Berechnung der Fernfelddaten, weisen im Vergleich dazu eine geringere Aufwandsordnung auf und sind demnach vernachlässigbar.

### 4.6.1 Erzeugung der Systemmatrix

Das symmetrieerhaltend diskretisierte Ausgangsproblem ist äquivalent zu dem aus einer gleichartigen Diskretisierung des Fundamentalgebiets hervorgehenden Satz von Gleichungssystemen und kann demzufolge zu Vergleichszwecken herangezogen werden. Bezeichnet  $N$  weiterhin die Anzahl der Basisfunktionen der reduzierten Probleme ohne Berücksichtigung der Bedingung an fixen Schnittkanten, so ergibt sich die Anzahl der Freiheitsgrade des äquivalenten Gesamtproblems näherungsweise zu

$$N_{\text{tot}} = \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} d_{\mathbf{R}} \sum_{m=1}^N d_{\mathbf{R},m} \approx N|G|, \quad \text{für: } |\mathbb{I}_{\text{fix}}| \ll N. \quad (4.6.1)$$

Dabei wurde berücksichtigt, dass die Dimension der Projektoren  $d_{\mathbf{R},m}$  nur für Elemente an fixen Schnittkanten, deren Anzahl für eine hinreichend feine Diskretisierung vergleichsweise gering ist, kleiner als die Dimension der irreduziblen Darstellungen  $d_{\mathbf{R}}$  sein kann. Der numerische Aufwand zur Generierung der reduzierten Impedanzmatrizen  $\underline{\mathbf{Z}}_{\mathbf{R}}$  kann aufgrund der komplexen Berechnungsvorschrift und nicht zuletzt wegen der starken Abhängigkeit von der konkreten Implementierung nur schwer beziffert werden. Aus diesem Grund sollen die Kosten für die Berechnung und Speicherung der vollen Impedanzmatrix  $\underline{\mathbf{Z}}$  als Bezugsgrößen dienen, für deren Elemente gemäß Gleichung (2.3.20) ein Rechenaufwand von  $K_{\text{CPU}} \text{ flops}^6$  und ein Speicherbedarf von  $K_{\text{RAM}}$  Bytes angesetzt werden. Demnach betragen der gesamte Rechenaufwand und Speicherbedarf

$$C_{\text{CPU}} \approx K_{\text{CPU}} |G|^2 N^2 \text{ flops}, \quad C_{\text{RAM}} \approx K_{\text{RAM}} |G|^2 N^2 \text{ Bytes}, \quad (4.6.2)$$

die beide erwartungsgemäß quadratisch mit der Anzahl von Unbekannten anwachsen. Die Generierung der reduzierten Impedanzmatrizen lässt zwei unterschiedliche algorithmische Konzepte zu, die sich durch bestimmte Vorzüge und Nachteile auszeichnen und nachfolgend diskutiert werden.

### Speichereffiziente Implementierung

Im Unterschied zur Berechnung der Beiträge der vollen Impedanzmatrix treten bei der Auswertung der Integrale in Gleichung (4.4.14) anstelle der GREENSchen Freiraumfunktion ihre harmonischen Komponenten auf. Es soll im weiteren Verlauf davon ausgegangen werden, dass die FOURIER-Transformation der GREENSchen Funktion, deren numerischer Aufwand proportional zu  $d_{\mathbf{R}}^2 |G|$  flops ist, gegenüber der Ausführung der Quadratur, die eine unvermeidbare Auswertung der transzendenten Exponentialfunktion erfordert, vernachlässigbar ist. Unter dieser Annahme sind bei komponentenweiser Auswertung der  $(d_{\mathbf{R}} \times d_{\mathbf{R}})$ -Submatrizen in Gleichung (4.4.14) näherungsweise  $K_{\text{CPU}} |G| d_{\mathbf{R}}^2$  flops notwendig, wenn beachtet wird, dass der modifizierte Integralkern aus  $|G|$  Summanden besteht. Da die Gleichungssysteme sequentiell aufgestellt und ausgewertet werden können, bestimmt die zur Darstellung mit der höchsten Dimension gehörende Systemmatrix den maximalen Speicherbedarf. Aus den daraus resultierenden Gesamtkomplexitäten

$$\hat{C}_{\text{CPU}} \approx K_{\text{CPU}} |G|^2 N^2 \text{ flops}, \quad \hat{C}_{\text{RAM}} \approx K_{\text{RAM}} N^2 \max_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} d_{\mathbf{R}}^2 \text{ Bytes}, \quad (4.6.3)$$

ergeben sich schließlich die Reduktionsfaktoren näherungsweise zu

$$R_{\text{CPU}} := \frac{\hat{C}_{\text{CPU}}}{C_{\text{CPU}}} \approx 1, \quad R_{\text{RAM}} := \frac{\hat{C}_{\text{RAM}}}{C_{\text{RAM}}} \approx \frac{\max_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} d_{\mathbf{R}}^2}{|G|^2}. \quad (4.6.4)$$

Aus diesem Ergebnis geht hervor, dass diese Vorgehensweise zwar keinen Vorteil in der Rechenzeit bei der Generierung der Impedanzmatrizen bietet, dafür sinkt jedoch der benötigte Speicherplatzbedarf um einen beträchtlichen Faktor, der in Tabelle 4.3 für einige ausgewählte Symmetriegruppen angegeben ist.

### Rechenzeiteffiziente Implementierung

Alternativ können einmalig die Matrizen  $\underline{\mathbf{Z}}(g)$  aufgestellt und aus diesen anschließend die Systemmatrizen  $\underline{\mathbf{Z}}_{\mathbf{R}}$  für jeden Symmetrietyp mittels einer algebraischen FOURIER-Transformation auf Gruppen gemäß Gleichung (4.4.21a) konstruiert werden. Die als dominierender Anteil angenommene, numerische Integration wird durch dieses Vorgehen auf

<sup>6</sup>Die Einheit „flop“ („floating point operation“) entspricht einer arithmetischen Fließkommaoperation.

ein Mindestmaß beschränkt, womit sich die Rechenzeit im Vergleich zur vorherigen Strategie verringert. Der Preis dafür ist jedoch ein deutlich höherer Speicherbedarf, da zusätzlich zu den eigentlichen Systemmatrizen sämtliche Matrizen  $\underline{\mathbf{Z}}(g)$  während des gesamten Lösungsprozesses permanent im Speicher gehalten werden müssen. Unter Vernachlässigung der FOURIER-Transformation betragen der gesamte Aufwand zur Berechnung der Impedanzmatrizen und der Speicherbedarf näherungsweise

$$\hat{C}_{\text{CPU}} \approx K_{\text{CPU}} |G| N^2 \text{ flops}, \quad \hat{C}_{\text{RAM}} \approx K_{\text{RAM}} N^2 (|G| + \max_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} d_{\mathbf{R}}^2) \text{ Bytes}, \quad (4.6.5)$$

woraus die gesuchten Reduktionsfaktoren

$$R_{\text{CPU}} \approx \frac{1}{|G|}, \quad R_{\text{RAM}} \approx \frac{\max_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} d_{\mathbf{R}}^2}{|G|^2} + \frac{1}{|G|} \quad (4.6.6)$$

folgen. Für den Fall, dass genügend Speicherplatz zur Verfügung steht, ist diese Strategie zweifellos der direkten Berechnung der Systemmatrizen vorzuziehen.

## 4.6.2 Auswertung des Gleichungssystems

Ohne die Verwendung von Matrixkompressionsverfahren bieten iterative Lösungsverfahren bezüglich des Rechenaufwands gegenüber direkten Algorithmen bei dicht besetzten Matrizen keinen nennenswerten Vorteil, weshalb im weiteren Verlauf von der Verwendung eines direkten Verfahrens zur Lösung der linearen Gleichungssysteme ausgegangen wird. Ihre Komplexität kann approximativ zu

$$C_{\text{LUD}} \approx K_{\text{LUD}} |G|^3 N^3 \text{ flops} \quad (4.6.7)$$

abgeschätzt werden.

Für jeden Symmetrietyp  $\mathbf{R}$  ist die LU-Zerlegung oder Inversion einer  $(d_{\mathbf{R}} N \times d_{\mathbf{R}} N)$ -Matrix durchzuführen, womit sich der gesamte Aufwand zu

$$\hat{C}_{\text{LUD}} \approx \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} K_{\text{LUD}} (N d_{\mathbf{R}})^3 \text{ flops} \quad (4.6.8)$$

ergibt. Zwar ist jedes System für  $d_{\mathbf{R}}$  Anregungen zu lösen, die Faktorisierung oder Inversion der Matrix, die den Gesamtaufwand maßgeblich bestimmt, muss jedoch nur einmal durchgeführt werden. Der erreichbare Reduktionsfaktor errechnet sich somit zu

$$R_{\text{LUD}} \approx \frac{1}{|G|^3} \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} d_{\mathbf{R}}^3, \quad (4.6.9)$$

wofür ebenfalls in Tabelle 4.3 einige exemplarische Werte angegeben sind.

Bei diesen Betrachtungen wurde davon ausgegangen, dass alle Symmetriekomponenten der Anregung von Null verschieden sind und demzufolge die Gleichungssysteme für alle Symmetrietypen ausgewertet werden müssen. Weist die Anregung und damit auch die gesuchte Lösung eine bestimmte Symmetrie auf, verringert sich zwangsläufig die Anzahl der nichttrivialen Teilprobleme, wodurch der erzielbare Rechenzeitvorteil gegenüber der Auswertung des Gesamtproblems weiter zunimmt.

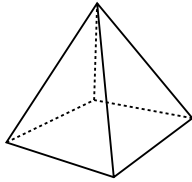
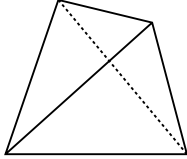
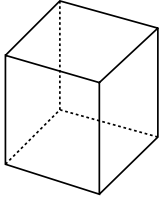
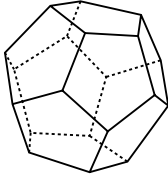
				
	Pyramide	Tetraeder	Würfel	Dodekaeder
Gruppe	$C_{4v}$	$T_d$	$O_h$	$I_h$
Ordnung	8	24	48	120
Symmetrie- typen	$A_1, A_2, B_1,$ $B_2, E$	$A_1, A_2, E,$ $T_1, T_2$	$A_{1g}, A_{1u}, A_{2g},$ $A_{2u}, E_g, E_u$ $T_{1g}, T_{1u},$ $T_{2g}, T_{2u}$	$A_g, A_u, T_{1g},$ $T_{1u}, T_{2g}, T_{2u}$ $G_g, G_u,$ $H_g, H_u$
$R_{\text{LUD}}$	1/42	1/230	1/864	1/3540
$R_{\text{RAM}}$	1/16	1/64	1/256	1/576

Tabelle 4.3: Erzielbare Reduktionsfaktoren bezüglich des Speicherbedarfs bei speicheroptimaler Implementierung sowie bezüglich des Rechenaufwands zur Lösung des diskreten Modellproblems bei Verwendung direkter Verfahren für ausgewählte Punktsymmetriegruppen.

Um den gesamten Rechenzeitgewinn abschätzen zu können, müssen die Konstanten  $K_{\text{CPU}}$  und  $K_{\text{LUD}}$  bestimmt werden, wozu präzisere Modelle für die Matrixgenerierung und die LU-Zerlegung, die stark von den verwendeten Algorithmen und der rechentechnischen Umsetzung abhängen, zu entwickeln sind. Aufgrund der höheren Aufwandsordnung der LU-Zerlegung wird jedoch mit wachsender Problemgröße die Auswertung der Gleichungssysteme dominieren, so dass der gesamte Reduktionsfaktor gegen  $R_{\text{LUD}}$  strebt.

# Kapitel 5

## Anwendungsbeispiele

*Aufgabenstellungen mit symmetrischen Anordnungen, die bevorzugt mittels der Randelementmethode modelliert werden, sind in der praktischen Anwendung vielfach anzutreffen. Im Folgenden werden die Einsetzbarkeit und Leistungsfähigkeit des im letzten Kapitel vorgestellten Verfahrens zur Reduktion der elektrischen Feldintegralgleichung auf eine Symmetriezelle anhand ausgewählter praxisnaher Problemstellungen, die aus zwei typischen Anwendungsgebieten der Randelementmethode stammen, demonstriert sowie die damit verbundenen Vorteile bei der numerischen Behandlung aufgezeigt. Die Untersuchung der in der Schifffahrt zum Einsatz kommenden, oktaedrischen Radarreflektoren als Vertreter elektromagnetischer Streuprobleme ist Gegenstand des ersten Abschnitts, dem sich eine Eigenwertanalyse der aus neun Zellen bestehenden TESLA-Kavität anschließt.*

### 5.1 Oktaedrische Radarreflektoren

Passive Radarreflektoren kommen unter anderem in der Schifffahrt zum Einsatz, um die Sichtbarkeit, vor allem von kleinen Schiffen, durch Radarsysteme zu erhöhen und damit das Risiko von Kollisionen, insbesondere bei schlechten Witterungsverhältnissen, zu verringern. Von derartigen Vorrichtungen wird ein möglichst hoher Reflexionsgrad bei geringen geometrischen Abmessungen gefordert, damit einerseits die gewünschte Erhöhung der effektiven Rückstreufäche des Schiffes erreichbar ist, aber auch andererseits eine platzsparende Unterbringung des Reflektors erfolgen kann. Des Weiteren müssen dessen Reflexionseigenschaften in einem gewissen Bereich weitestgehend unabhängig von der Einfallsrichtung des Radarsignals sein, weil die Fahrtrichtung und mögliche Neigungen des Schiffes die Lage des Reflektors beeinflussen. Für Radaranwendungen in der Schifffahrt und Küstenüberwachung sind zwei verschiedene Frequenzbereiche vorgesehen. Radaranlagen im S-Band operieren bei einer Frequenz von  $f = 3 \text{ GHz}$ , was einer Freiraumwellenlänge von  $\lambda = 10 \text{ cm}$  entspricht, und zeichnen sich durch eine große Reichweite aus, weshalb sie bevorzugt auf hoher See eingesetzt werden. Ihre geringe Empfindlichkeit bietet zwar den Vorteil, dass ungewollte Ziele, die zum Beispiel durch Reflexionen an der Wasseroberfläche oder durch Niederschlag verursacht werden, besser unterdrückt werden. Kleine Schiffe oder Boote werden jedoch folglich auch nicht erfasst. In der Binnenschifffahrt und in Küstennähe werden vorwiegend Radargeräte im X-Band benutzt, deren Arbeitsfrequenz

ungefähr  $f = 9,4$  GHz beträgt. Das entspricht einer Freiraumwellenlänge von  $\lambda = 3,2$  cm, womit diese Anlagen wegen ihres höheren Auflösungsvermögens besser zur Detektion kleinerer Objekte geeignet sind, dafür aber eine deutlich geringere Reichweite besitzen. Die genaue Spezifikation der praxisrelevanten Kenngrößen, die Standards für Prüf- und Testverfahren sowie die Mindestanforderungen, die ein Radarreflektor zu erfüllen hat, sind für das X-Band in der ISO-Norm 8729 geregelt [55].



Abbildung 5.1: *Typische Bauformen oktaedrischer Radarreflektoren. Drei relativ dünne, elektrisch gut leitfähige Platten, die sich paarweise senkrecht schneiden, bilden einen aus acht Tripel-Spiegeln bestehenden Winkelreflektor, der die Symmetrie der vollen Oktaedergruppe besitzt. Abhängig von der geometrischen Gestalt der einzelnen Reflektorflächen ergeben sich unterschiedliche Ausführungen dieses Reflektortyps.*

Maritime Radaranlagen sind üblicherweise mit einer kombinierten Sende- und Empfangseinheit ausgestattet, so dass das Reflexionsvermögen eines Ziels in Einfallsrichtung der Radarwellen von maßgeblichem Interesse ist. Aus diesem Grund ist der monostatische Rückstreuquerschnitt der entscheidende Designparameter bei der Konstruktion von passiven Radarreflektoren. Um den genannten Forderungen gerecht zu werden, sind spezielle Konzepte hinsichtlich der Bauform erforderlich. Grundelement der in diesem Abschnitt untersuchten Strukturen bildet ein Winkelreflektor, der aus drei ebenen, paarweise senkrecht zueinander angeordneten Platten identischer Form besteht, die durch eine hohe elektrische Leitfähigkeit gekennzeichnet sind. Diese Konfiguration weist unter optischen Bedingungen die besondere Eigenschaft auf, dass eine elektromagnetische Welle, die aus einer beliebigen Richtung innerhalb des Öffnungswinkels des Reflektors einfällt, in exakt die gleiche Richtung zurückgestrahlt wird. Durch symmetrische Aneinanderreihung von acht derartigen Tripel-Spiegeln kann die gewünschte Richtungsunabhängigkeit des Rückstreuquerschnitts über den Wirkungsbereich eines einzelnen Winkelreflektors hinaus auf den gesamten Raum ausgedehnt werden. Auch wenn die Wellenlänge im Bereich der Reflektorabmessungen liegt und damit optische Annahmen ihre Gültigkeit verlieren, besitzt dieser Aufbau infolge von Resonanzeffekten eine größere effektive Rückstreufäche als andere Konfigurationen mit vergleichbaren geometrischen Abmessungen, weshalb Winkelreflektoren auch in diesem Frequenzbereich Verwendung finden.

In Abbildung 5.1 sind in der Praxis vorkommende Ausführungsformen oktaedrischer Radarreflektoren gezeigt, deren Rückstreuverhalten im Folgenden näher analysiert werden soll. Die betrachteten Streukörper bestehen aus drei kreisförmigen, quadratischen oder

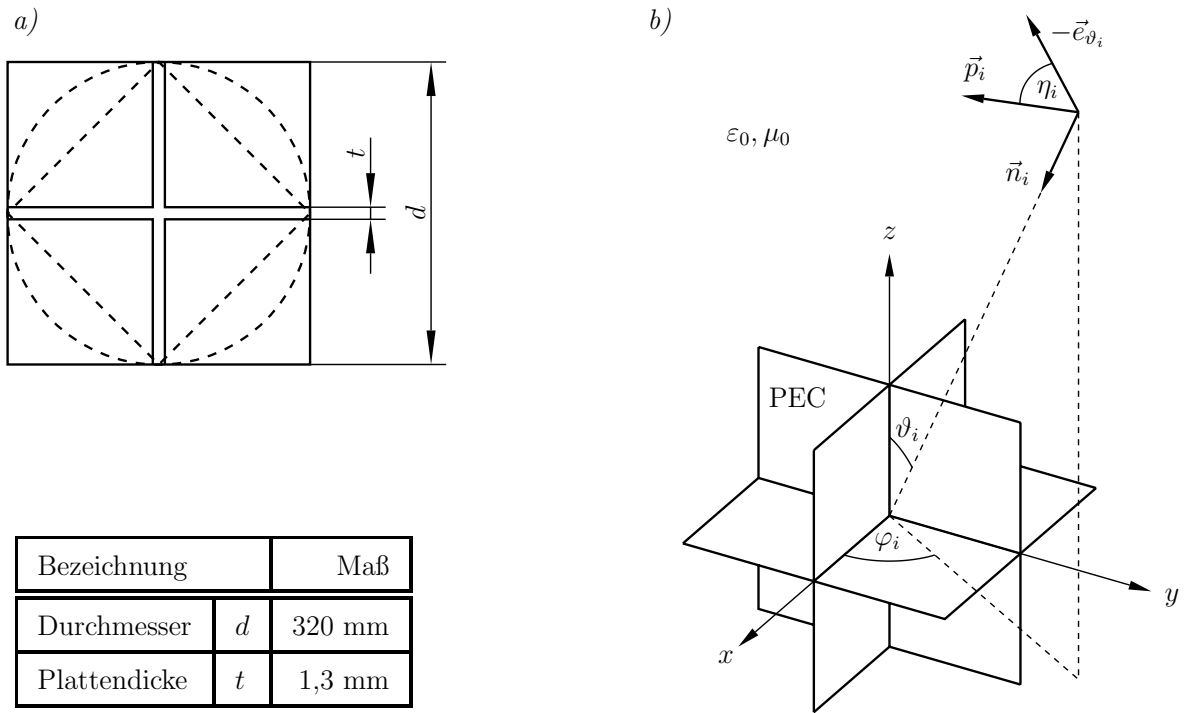


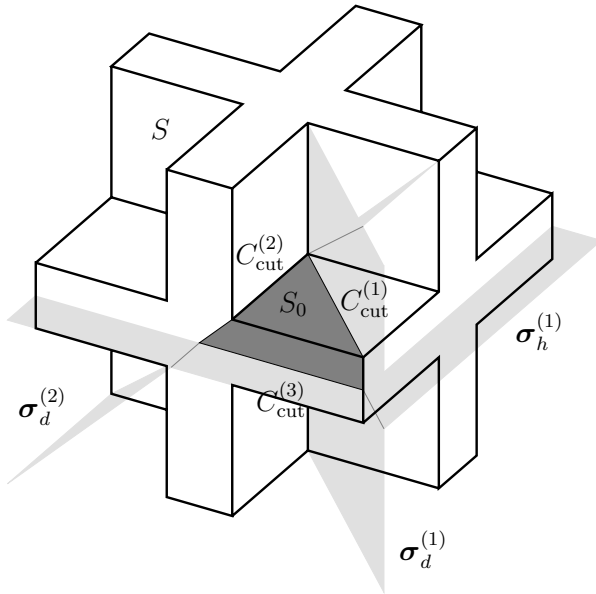
Abbildung 5.2: Geometrische Abmessungen der zu untersuchenden Streukörper (a) sowie die Spezifikation der Anregung (b).

dreieckigen Platten geringer Dicke, die sich paarweise senkrecht schneiden. Der gewählte Durchmesser der Reflektorplatten, die gewöhnlich aus Aluminium gefertigt sind, sowie deren Dicke orientieren sich an typischen Abmessungen der für maritime Zwecke kommerziell angebotenen Winkelreflektoren und können Abbildung 5.2a) entnommen werden.

Zum Zweck einer numerischen Behandlung dieses elektromagnetischen Streuproblems sind im Vorfeld einige vereinfachende Modellannahmen zu treffen. Aufgrund der hohen elektrischen Leitfähigkeit des Streukörpers können die zu erwartenden Verluste vernachlässigt werden, womit die Annahme eines ideal elektrisch leitfähigen Materials gerechtfertigt ist. Weiterhin soll sich das zu analysierende Streuobjekt im freien Raum befinden, dessen Materialeigenschaften durch die Permeabilität  $\mu_0$  und die Permittivität  $\epsilon_0$  des Vakuums beschrieben sind. Das einfallende Radarsignal wird durch eine linear polarisierte, ebene Welle gemäß Gleichung (2.2.31) nachgebildet. Das Koordinatensystem sei so gewählt, dass, wie in Abbildung 5.2b) illustriert, die kartesischen Koordinatenflächen mit den Reflektorflächen zusammenfallen.

Werden die Reflektorplatten als räumlich ausgedehnte Körper belassen, beschreibt die volle Oktaedergruppe  $O_h$  die höchste Symmetrie des hier betrachteten Reflektortyps. Da deren Ordnung  $|O_h| = 48$  beträgt, reduziert sich die Problemgröße auf ein Achtundvierzigstel des Gesamtgebiets. Das ausgewählte Fundamentalgebiet dieser Struktur, welches für den Winkelreflektor mit quadratischen Flächen in Abbildung 5.3a) dunkelgrau hervorgehoben ist, wird von den drei Schnittkanten  $C_{\text{cut}}^{(1)}$ ,  $C_{\text{cut}}^{(2)}$  und  $C_{\text{cut}}^{(3)}$  berandet, die fix unter den Spiegelsymmetriegruppen  $C_s^{(1)} = \{E, \sigma_d^{(1)}\}$ ,  $C_s^{(2)} = \{E, \sigma_d^{(2)}\}$  und  $C_s^{(3)} = \{E, \sigma_h^{(1)}\}$  sind. Die Symmetrieelemente der Erzeugendensysteme sind ebenfalls in Abbildung 5.3a) eingezeichnet.

a) räumlich ausgedehnte Struktur  
(Symmetrie der  $O_h$ -Gruppe)



b) unendlich dünne Struktur  
(Symmetrie der  $O$ -Gruppe)

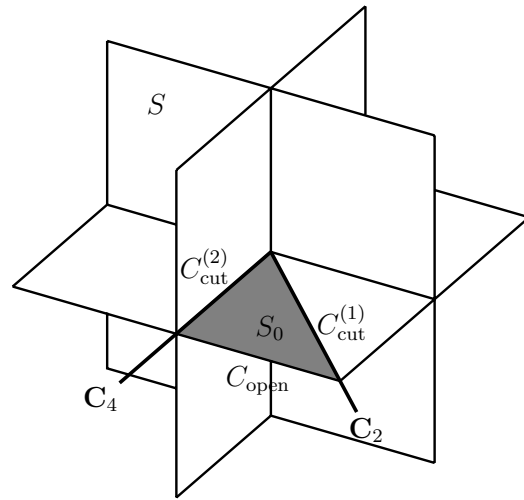


Abbildung 5.3: Winkelreflektor mit quadratischen Flächen und zugehöriges Fundamentalgebiet sowie die Symmetrieelemente der Fixpunktgruppen der Schnitkanten für unterschiedliche Modellierungsvarianten. Bei räumlich ausgedehnten Reflektorflächen (a) ist das dunkelgrau dargestellte Fundamentalgebiet von drei fixen Schnitkanten berandet. Unter der vereinfachenden Annahme unendlich dünner Platten (b) setzt sich der Rand hingegen aus zwei fixen Schnitkanten und einem offenen Abschnitt zusammen.

Eine weitere Modellierungsvariante dieses Reflektors ergibt sich, wenn, wie es auch bei der vorliegenden Problemstellung der Fall ist, die Dicke der Reflektorplatten im Verhältnis zur Wellenlänge sehr gering ist, so dass diese als flächenhafte Gebiete aufgefasst werden können. Als volle Symmetriegruppe des aus dieser idealisierten Annahme hervorgehenden mathematischen Modells, das in Abbildung 5.3b) gezeigt ist, kann die Oktaedergruppe  $O$ , deren Ordnung  $|O| = 24$  beträgt, festgestellt werden. Grund für die im Vergleich zur ausgedehnten Struktur niedrigere Symmetrie ist, dass infolge der reduzierten Dimension des geometrischen Objekts bestimmte Symmetrieelemente der vollen Oktaedergruppe dieselbe Wirkung haben und damit nicht voneinander unterscheidbar sind. Die in Abbildung 5.3b) dunkelgrau hinterlegte, dreieckförmige Fläche repräsentiert ein mögliches Fundamentalgebiet dieser Struktur, das von zwei Schnitkanten  $C_{\text{cut}}^{(1)}$  und  $C_{\text{cut}}^{(2)}$ , die fix unter den diskreten Drehgruppen  $C_2 = \{E, C_2\}$  und  $C_4 = \{E, C_4, C_4^2, C_4^3\}$  sind, sowie einem Randabschnitt, auf dem die übliche Randbedingung für offene Flächenstücke erfüllt sein muss, begrenzt wird.

Die symmetrischen Merkmale der vorliegenden Aufgabenstellung lassen vermuten, dass auch der örtliche Verlauf des monostatischen Rückstreuquerschnittes eine gewisse Symmetrie aufweist, die jedoch entscheidend von den Eigenschaften der anregenden Welle bestimmt wird. Bedingt durch die ausgeprägte Schwingungsrichtung der hier angenommenen linear polarisierten Transversalwelle wird die gesuchte Zielgröße lediglich eine partielle Symmetrie der geometrischen Struktur besitzen. Aus anschaulichen Überlegungen folgt für eine beliebige Polarisationsrichtung, dass diese Ortsfunktion in azimuthaler Rich-



tung durch eine vierfache und in polarer Richtung durch eine zweifache Periodizität gekennzeichnet ist. Folglich besitzt sie eine 8-fache Symmetrie, welche durch die aus einer Elementardrehung um die vierzählige Polachse und einer Elementardrehung um eine senkrecht dazu stehende, zweizählige Achse erzeugten Untergruppe der vollen Oktaedergruppe beschrieben ist, womit sich auf die Betrachtung eines Oktanten beschränkt werden darf. Für bestimmte Werte des Polarisationswinkels oder bei Anregung mit einer zirkular polarisierten Welle kann sich die Symmetrie dieser Ortsfunktion weiter erhöhen, worauf jedoch nicht näher eingegangen werden soll.

Größe	kreisförmige Spiegel		quadratische Spiegel		dreieckige Spiegel	
	S-Band	X-Band	S-Band	X-Band	S-Band	X-Band
$N_{A_1}$	518	4979	630	6048	315	2970
$N_{A_2}$	560	5109	672	6176	345	3060
$N_E$	1078	10088	1302	12224	660	6030
$N_{T_1}$	1638	15197	1974	18400	1005	9090
$N_{T_2}$	1638	15197	1974	18400	1005	9090
$N_{\text{tot}}$	13062	121446	15750	147072	8010	72630

Tabelle 5.1: Resultierende Problemgröße für jeden Symmetrietyp der O-Gruppe bei Reduktion der als unendlich dünn angenommenen Winkelreflektoren auf ein Fundamentalgebiet. Zum Vergleich ist in der letzten Zeile der Tabelle die Anzahl der Freiheitsgrade bei symmetrieehaltender Diskretisierung der vollständigen Struktur angegeben.

Von allen in Abbildung 5.1 gezeigten Konfigurationen des oktaedrischen Winkelreflektors wurde der monostatische Rückstreuquerschnitt im Winkelbereich  $0 \leq \vartheta_i \leq 90^\circ$  und  $0 \leq \varphi_i \leq 90^\circ$  sowohl für das S-Band ( $f = 3$  GHz) als auch für das X-Band ( $f = 9,4$  GHz) numerisch ermittelt, wobei zu Vergleichszwecken die beiden in Abbildung 5.3 vorgestellten Modellvarianten herangezogen wurden. Die räumliche Auflösung des Beobachtungsbereichs wurde zu  $\Delta\vartheta_i = 1^\circ$  und  $\Delta\varphi_i = 1^\circ$  gewählt, so dass sich für jedes der zu untersuchenden Streuprobleme insgesamt  $N_i = 8281$  unterschiedliche Anregungen ergaben. Da es der verfügbare Arbeitsspeicher der Rechenanlage zuließ, wurde zur Lösung der linearen Gleichungssysteme ein direktes Verfahren einem iterativen Algorithmus vorgezogen. Damit ist für jeden Symmetrietyp eine einmalige LU-Zerlegung der Impedanzmatrix vorzunehmen und durch anschließendes Rückwärtseinsetzen die  $d_{\mathbf{R}}N_i$  Lösungsvektoren zu bestimmen. Aufgrund der speziellen Wahl des Polarisationswinkels zu  $\eta_i = 0$  ist die gesuchte Zielfunktion zwar zusätzlich spiegelsymmetrisch bezüglich der Ebene  $\varphi = 45^\circ$  und besitzt somit eine 16-fache Symmetrie, diese Eigenschaft wurde jedoch nicht weiter ausgenutzt. Die numerische Berechnung der zur Aufstellung der Impedanzmatrix, des Anregungsvektors und der Fernfeldmatrix erforderlichen Integrale über die dreieckigen Elementargebiete erfolgte mit Hilfe einer direkten 3-Punkte GAUSS-Quadraturformel. In Tabelle 5.1 sind die Problemgrößen  $N_{\mathbf{R}}$ , die aus der Diskretisierung eines Fundamentalgebiets des Winkelreflektors unter Vernachlässigung der Plattendicke resultieren, für jeden Symmetrietyp der Oktaedergruppen aufgelistet, wenn die Gitterschrittweite auf ein Zehntel der Wellenlänge

Größe	kreisförmige Spiegel		quadratische Spiegel		dreieckige Spiegel	
	S-Band	X-Band	S-Band	X-Band	S-Band	X-Band
$N_{A_{1g}}$	745	8327	1126	10976	504	5355
$N_{A_{1u}}$	815	8566	1217	11260	570	5547
$N_{A_{2g}}$	795	8496	1191	11180	553	5491
$N_{A_{2u}}$	765	8397	1152	11056	521	5411
$N_{E_g}$	1540	16823	2317	22156	1057	10846
$N_{E_u}$	1580	16963	2369	22316	1091	10958
$N_{T_{1g}}$	2325	25290	3495	33292	1595	16313
$N_{T_{1u}}$	2355	25389	3534	33416	1627	16393
$N_{T_{2g}}$	2375	25459	3560	33496	1644	16449
$N_{T_{2u}}$	2305	25220	3469	33212	1578	16257
$N_{\text{tot}}$	37440	405432	56232	533664	25776	261648

Tabelle 5.2: Resultierende Problemgröße für jeden Symmetriotyp der  $O_h$ -Gruppe bei Reduktion der zu untersuchenden Reflektoren auf ein Fundamentalgebiet ohne Vernachlässigung der Plattendicke. Zum Vergleich ist in der letzten Zeile der Tabelle die Anzahl der Freiheitsgrade bei symmetrieerhaltender Diskretisierung der vollständigen Struktur angegeben.

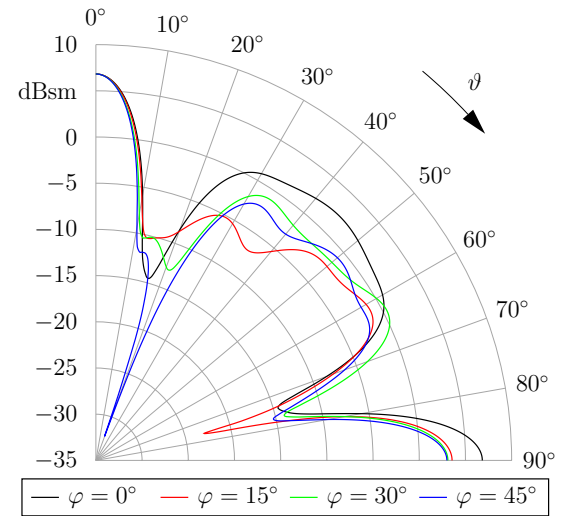
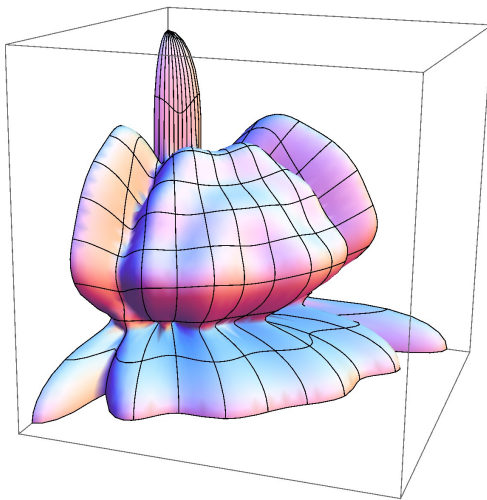
$h = \lambda/10$  festgelegt wird. Zu beachten ist, dass wegen der unterschiedlichen geometrischen Formen der Reflektorplatten die Flächeninhalte der Fundamentalgebiete und damit die diskreten Problemgrößen bei identischen Kantenlängen verschieden sind. Entsprechend sind in Tabelle 5.2 die sich ergebenden diskreten Problemgrößen bei Modellierung des Reflektors als räumlich ausgedehnter Körper zusammengefasst. Zum Vergleich ist für beide Fälle zusätzlich die Größe des dazu äquivalenten Problems

$$N_{\text{tot}} = \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{R}} d_{\mathbf{R}} N_{\mathbf{R}}, \quad (5.1.1)$$

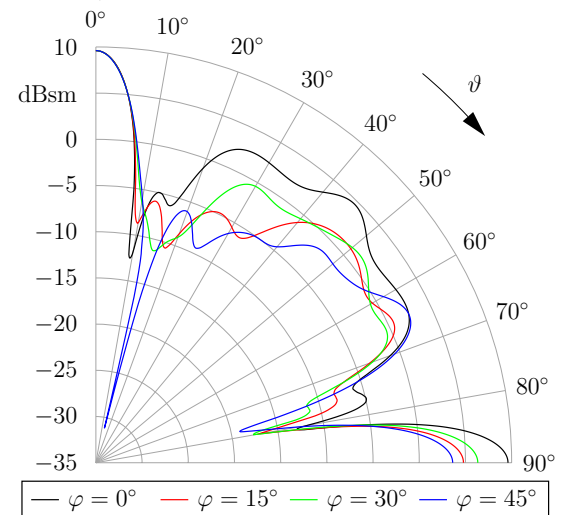
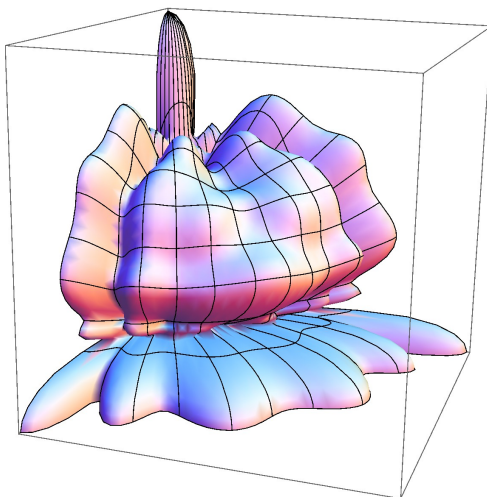
das aus einer symmetriegerechten Diskretisierung der gesamten Struktur hervorgeht, angegeben. Stellt man die beiden möglichen Modellvarianten gegenüber, ist leicht erkennbar, dass sich die Größen der Fundamentalgebiete nur unwesentlich voneinander unterscheiden. Die Anzahl der Symmetriotypen der vollen Oktaedergruppe  $O_h$  ist jedoch genau doppelt so hoch wie die der Oktaedergruppe  $O$ , so dass sich folglich auch der Aufwand zur Lösung der Gleichungssysteme verdoppelt.

Die unter Verwendung der Methode der Symmetriezellenreduktion gewonnenen Simulationsergebnisse sind für das S-Band in Abbildung 5.4 und für das X-Band in Abbildung 5.5 grafisch veranschaulicht. Gezeigt ist der monostatische Rückstreuquerschnitt der drei vorgestellten Reflektorausführungen sowohl in einer dreidimensionalen Darstellungsweise, die

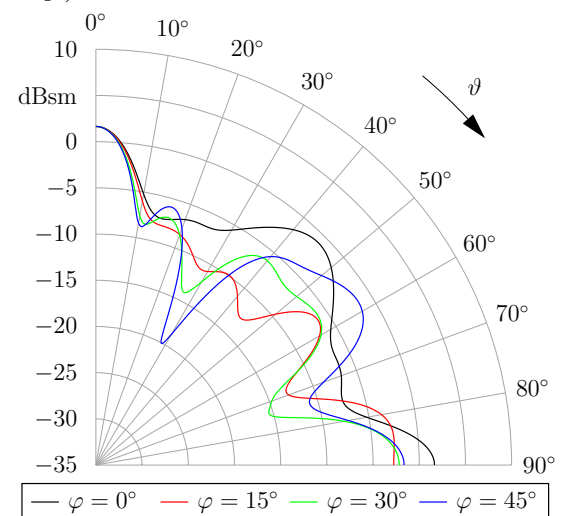
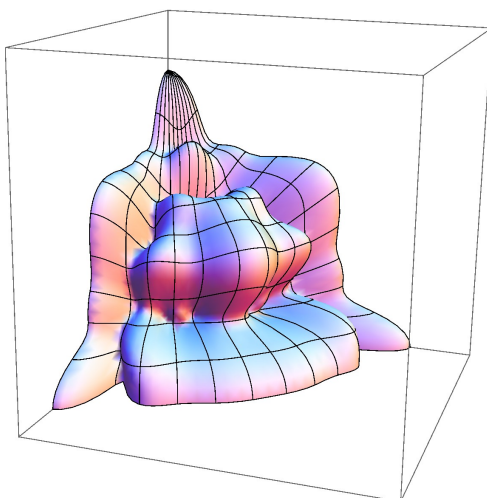
a) kreisförmige Reflektorplatten (Dicke vernachlässigt)



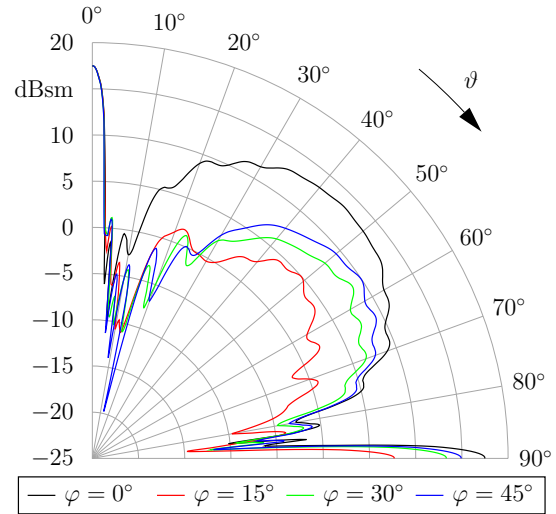
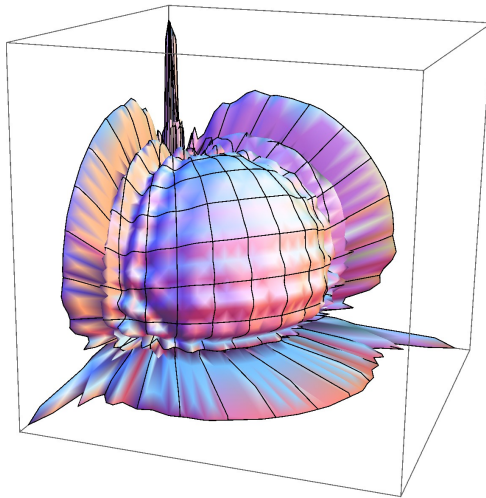
b) quadratische Reflektorplatten (Dicke vernachlässigt)



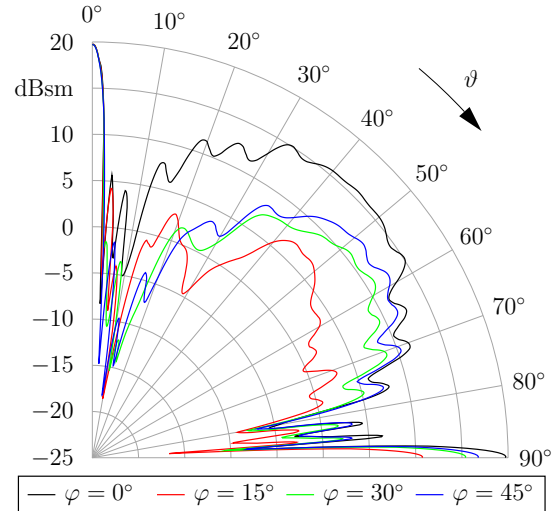
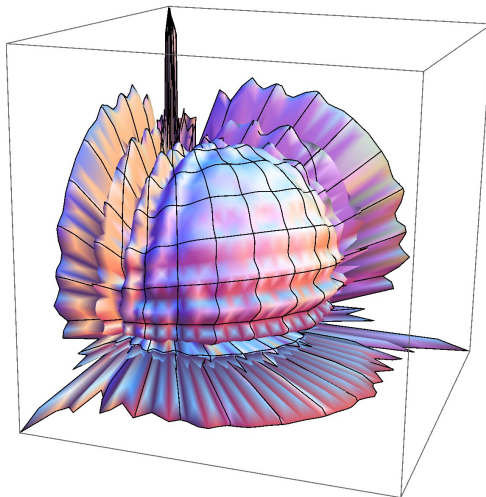
c) dreieckige Reflektorplatten (Dicke vernachlässigt)

Abbildung 5.4: Monostatischer Rückstreuquerschnitt bei einer Frequenz von  $f = 3 \text{ GHz}$ .

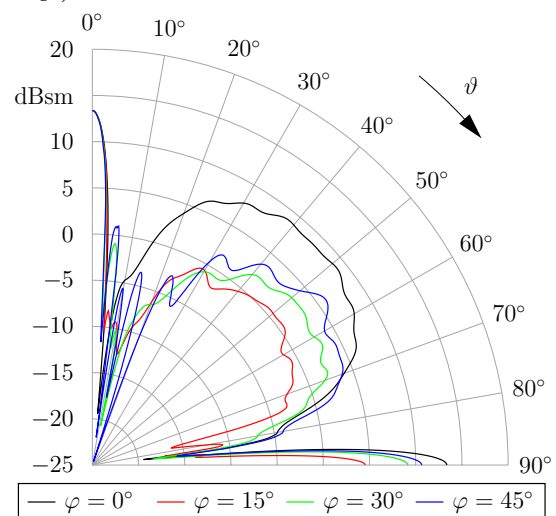
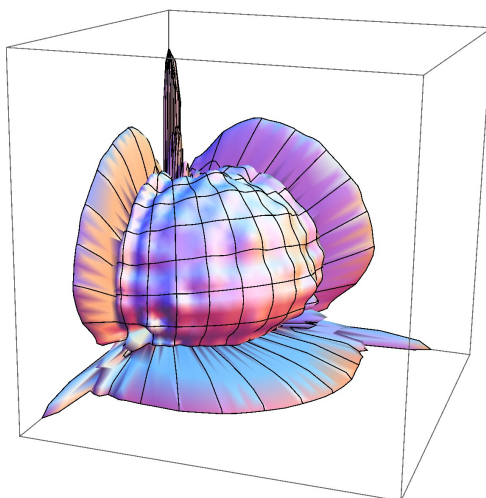
a) kreisförmige Reflektorplatten (Dicke vernachlässigt)



b) quadratische Reflektorplatten (Dicke vernachlässigt)



c) dreieckige Reflektorplatten (Dicke vernachlässigt)

Abbildung 5.5: Monostatischer Rückstreuquerschnitt bei einer Frequenz von  $f = 9,4 \text{ GHz}$ .

einen guten Einblick in den qualitativen Verlauf der Richtungscharakteristik gestattet, als auch in Form einer Parameterschar, die den Vorteil einer besseren quantitativen Aussagekraft besitzt. Erwartungsgemäß unterscheiden sich die Resultate, die auf Basis der beiden möglichen Modellvarianten erhalten wurden, wegen der äußerst geringen Dicke der Reflektorplatten nur sehr geringfügig voneinander, weshalb diese nur für die flächenhaften Strukturen gezeigt sind.

Aus den präsentierten Ergebnissen wird deutlich, dass die untersuchten Winkelreflektoren innerhalb eines relativ großen Raumwinkelbereichs um den Symmetrieachsen der einzelnen Tripel-Spiegel (z.B.  $\vartheta_i = 45^\circ$ ,  $\varphi_i = 45^\circ$ ) sehr gute Reflexionseigenschaften besitzen. Dazwischen ist der Rückstreuquerschnitt jedoch stark richtungsabhängig und weist zudem stellenweise unzureichende Werte auf. Unter Beachtung, dass sich Radarwellen in horizontaler Richtung ausbreiten, wird demnach die größtmögliche Effizienz durch eine geneigte Anbringung derartiger Winkelreflektoren erreicht. Da das Aufzeigen der Einsetzbarkeit und Leistungsfähigkeit der vorgestellten Reduktionsmethode im Vordergrund steht, soll die Eignung und Praxistauglichkeit dieser Reflektoren nicht weiter untersucht werden. Eine ausführliche Bewertung der Effektivität von Winkelreflektoren auf Grundlage der in der ISO-Norm 8729 empfohlenen Spezifikation sowie unter Einbeziehung praktischer Gesichtspunkte findet sich in [35].

## 5.2 TESLA-Kavität

Eines der zentralen Elemente supraleitender Linearbeschleuniger, die auf der TESLA<sup>1</sup>-Technologie basieren, ist der in Abbildung 5.6 gezeigte Hohlraumresonator, der aus neun Einzelzellen besteht und aus Niob gefertigt ist [21]. Beschleunigeranlagen finden allgemein sowohl in der Grundlagenforschung für Experimente in der Hochenergiephysik als auch in praktischen Bereichen, wie beispielsweise in der Medizin zu strahlentherapeutischen Zwecken, Verwendung.

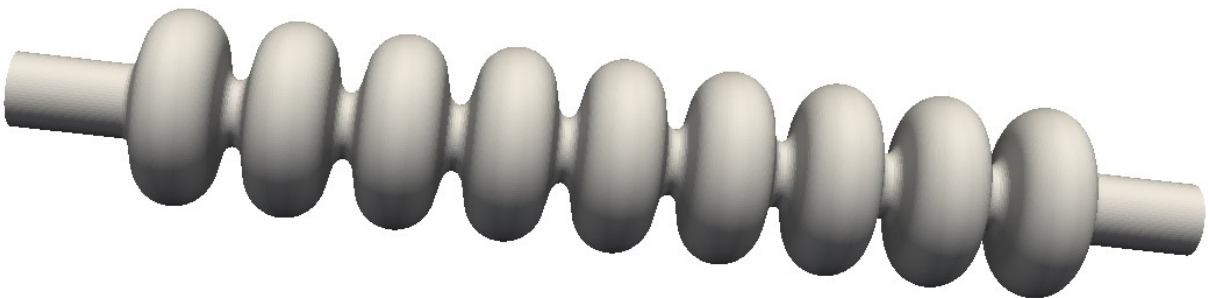


Abbildung 5.6: *Aufbau der TESLA Kavität. Dieser aus Niob bestehende Hohlraumresonator setzt sich aus neun, hintereinander angeordneten Einzelzellen zusammen.*

Kavitäten nutzen den Effekt der Resonanzüberhöhung, so dass bei einer zeitharmonischen Anregung mit einer geeigneten Resonanzfrequenz sehr hohe Feldstärken zur wirksamen Beschleunigung geladener Teilchen erzielbar sind. Zur Erhöhung der Effektivität werden

<sup>1</sup>Das Akronym TESLA bedeutet „*TeV-Energy Superconducting Linear Accelerator*“.

meist mehrere Einzelzellen gekoppelt, womit sich die Eigenfrequenzen eines einzelnen Resonators entsprechend der Zellenzahl dieser Resonatorkette aufspalten. Die monopolartige Eigenwelle mit einem Phasenvorschub pro Zelle von  $\varphi = \pi$ , deren Eigenfrequenz auf  $f = 1,3$  GHz abgestimmt ist, dient als Beschleunigungsmodus der TESLA-Kavität.

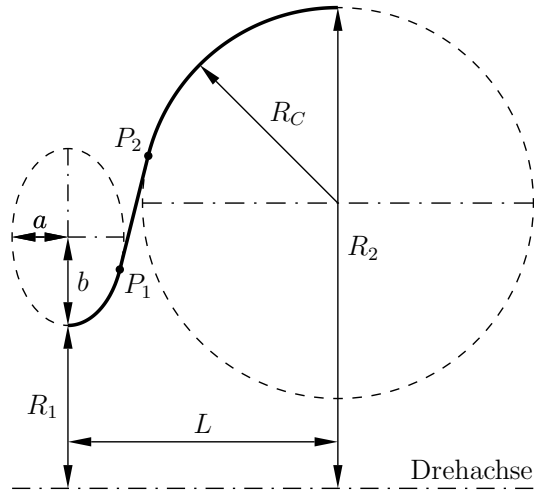
Zur Abbildung der realen Anordnung auf ein mathematisches Modell sind einige Annahmen zu treffen und Vereinfachungen vorzunehmen. Da sich das verwendete Material unter normalen Betriebsbedingungen im supraleitenden Zustand befindet, ist die Modellierung als ideal elektrisch leitfähige Struktur zulässig. Zudem ist der Resonator fast vollständig evakuiert, womit im Innenraum konstante Materialverhältnisse angenommen werden dürfen. In der Praxis ist die hier betrachtete Struktur über Strahlrohre mit weiteren, baugleichen Kavitäten verbunden. Diese Verbindungselemente sind so bemessen, dass die Beschleunigungsmoden der einzelnen Resonatoren weitestgehend voneinander entkoppelt sind. Da die niedrigste Grenzfrequenz des Strahlrohrs ungefähr  $f = 2,2$  GHz beträgt, werden darin neben der Beschleunigungsmodus auch höhere Eigenwellen stark gedämpft, so dass zur Bestimmung der Eigenfrequenzen der ersten drei Passbänder eine isolierte Betrachtung einer einzelnen TESLA-Kavität möglich ist. Der Abschluss der Strahlrohrenden des so beschränkten Modells hat bei einer hinreichenden Strahlrohlänge einen nur vernachlässigbaren Einfluss auf das Ergebnis und soll der Einfachheit halber in Form einer elektrischen Randbedingung vorgegeben sein. Des Weiteren werden Koppler zur Einspeisung der Hochfrequenzleistung und zur Dämpfung höherer Moden vernachlässigt, womit letztendlich eine rotationssymmetrische Modellgeometrie resultiert. Gegenstand der Untersuchung ist die symmetrische Ausführungsform der TESLA-Kavität, die aus sieben Mittelzellen sowie zwei identischen Endzellen, die über Irisblenden miteinander gekoppelt sind, aufgebaut ist. Daneben gibt es eine Weiterentwicklung, bei der die Abmessungen der Anfangszelle geringfügig von denen der Endzelle abweichen, wodurch eine Unterdrückung gefangener höherer Moden erreicht wird. Die generierende Kurve einer Halbzelle, die zusammen mit den Geometriedaten in Abbildung 5.7 gezeigt ist, besteht aus einem Ellipsenbogen und einem Kreisbogen, welche über einen gemeinsamen Tangentenabschnitt miteinander verbunden sind. Aus der Bedingung der stetigen Differenzierbarkeit dieser Kurve sind die Berührungspunkte  $P_1$  und  $P_2$  eindeutig festgelegt, können aber nur numerisch berechnet werden.

Die höchste Symmetrie des vorliegenden geometrischen Modells wird zwar durch die kontinuierliche  $D_{\infty h}$ -Gruppe beschrieben, hier soll sich aber mit Verweis auf den thematischen Schwerpunkt dieser Arbeit auf die finite Untergruppe  $D_{nh}$  beschränkt werden. Die Zähligkeit der Hauptachse  $n$  bestimmt die Größe des Fundamentalgebiets, die  $1/4n$  der des ursprünglichen Gebiets beträgt, und ist grundsätzlich frei wählbar. Es ist jedoch zu beachten, dass die diskrete Problemgröße nicht beliebig verringert werden kann. Wenn nämlich die Bogenlänge der azimuthalen Koordinatenlinie auf dem Flächenstück an der Stelle des maximalen Radius  $r_{\max}$  in die Größenordnung der vorgegebenen Gitterschrittweite  $h$  gelangt, dann nimmt der Verfeinerungsgrad in azimuthaler Richtung sein Minimum an. Unter der Annahme einer Triangulierung des Rechengebietes mit annähernd gleichseitigen Dreiecken wird dieser Punkt bei einer Zähligkeit von

$$n = \left\lceil \frac{2}{\sqrt{3}} \pi \frac{r_{\max}}{h} \right\rceil \quad (5.2.1)$$

erreicht. Eine Erhöhung der Zähligkeit darüber hinaus führt sogar zu einem Anstieg der diskreten Problemgröße, weil zur Vermeidung verzerrter Geometrien die Schrittweite her-

a)



b)

Bezeichnung		innere Zelle	Endzelle
Länge	$L$	57,692 mm	56,0 mm
Irisradius	$R_1$	35,0 mm	39,0 mm
Zellradius	$R_2$	103,3 mm	103,3 mm
Ellipsenradius	$a$	12,0 mm	10,0 mm
Ellipsenradius	$b$	19,0 mm	13,5 mm
Kreisradius	$R_C$	42,0 mm	40,3 mm
Strahlrohrlänge	$L_B$	346,0mm	

Abbildung 5.7: Generierende Kurve (a) sowie Geometrieparameter (b) einer Halbzelle der TESLA-Kavität mit spiegelsymmetrischer Bauform.

abgesetzt werden müsste. Optimale Reduktionsfaktoren ergeben sich demnach bei der in Gleichung (5.2.1) angegebenen Zähligkeit.

Die Randkurve des so erhaltenen reduzierten Rechengebiets lässt sich in drei Segmente, auf denen unterschiedliche Schnittkantenbedingungen gestellt sind, unterteilen. Randpunkte, die in einer der drei begrenzenden Spiegelebenen liegen, sind fix unter der durch die zugehörige vertikale oder horizontale Spiegelung erzeugten zweielementigen Untergruppe. In Abbildung 5.8 ist ein diskretisiertes Fundamentalgebiet der TESLA-Struktur gezeigt.

Anzumerken ist, dass sich bei Verwendung unterschiedlicher Endzellen die Symmetrie dieser Kavität auf die kontinuierliche Gruppe  $C_{\infty v}$  reduziert, wodurch sich die Gruppenordnung halbiert und die Größe des Fundamentalgebiets verdoppelt. Auch in diesem Fall kann zur Beschreibung der Symmetrie die finite Untergruppe  $C_{nv}$  mit einer passend gewählten Zähligkeit herangezogen werden. Weiterhin sei an dieser Stelle erwähnt, dass die Symmetriereduktion für rotationssymmetrische Strukturen auf Basis der kontinuierlichen zyklischen Gruppe  $C_{\infty}$ , die ebenfalls eine Untergruppe der  $D_{\infty h}$ -Gruppe ist, bereits eingehend analysiert und erfolgreich getestet wurde [53].

Für ein gezieltes Auffinden der interessierenden Eigenmoden ist es zweckmäßig, anhand einiger Vorüberlegungen deren Symmetrieeigenschaften festzustellen und so den Suchraum auf die relevanten Symmetrietypen einzugrenzen. Die elektrische Feldstärke jeder Eigenwelle des untersten Passbandes besitzt eine longitudinale und eine radiale Komponente, die beide unabhängig vom Azimutwinkel sind. Daraus lässt sich schließen, dass diese nicht entarteten Monopol-Moden sowohl symmetrisch bezüglich der Drehung um die Hauptachse  $C_n$  als auch bezüglich der Spiegelung an der vertikalen Ebene  $\sigma_v$  sind und folglich dem Symmetrietyp  $A_1$  zugeordnet werden können. Moden, deren Phasenvorschub pro Zelle ein ungerades Vielfaches von  $\pi/9$  beträgt, sind zudem antisymmetrisch bezüglich der Spiegelung an der horizontalen Ebene  $\sigma_h$  und gehören zu Eigenräumen vom Typ  $A_{1u}$ , da die Normalkomponente der elektrischen Feldstärke an dieser Stelle nicht verschwindet.



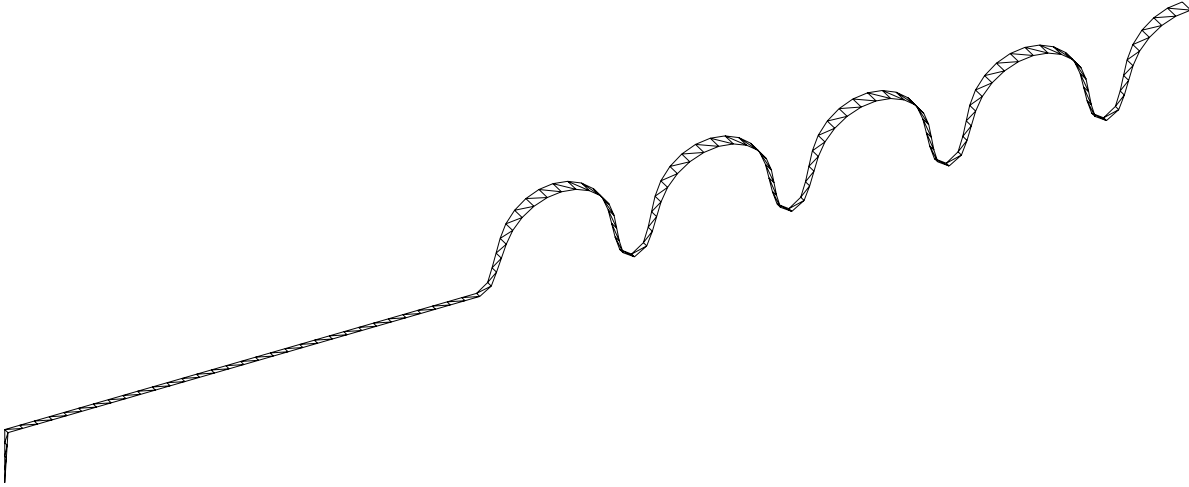


Abbildung 5.8: Diskretisiertes Fundamentalgebiet des untersuchten Hohlraumresonators. Als zugrunde liegende diskrete Symmetriegruppe wurde die  $D_{30h}$ -Gruppe gewählt, womit sich das Rechengebiet auf  $1/120$  der ursprünglichen Gebietsgröße reduziert. Bei einer Gitterschrittweite von  $h \approx 15$  mm resultieren insgesamt 233 Dreiecke.

Dementsprechend gehören Moden, deren Phasenvorschub pro Zelle ein gerades Vielfaches von  $\pi/9$  beträgt, zum Typ  $A_{1g}$  und sind somit vollsymmetrisch. Eigenwellen der beiden nächst höheren Passbänder haben Dipolcharakter und sind demzufolge zweifach entartet. Aufgrund ihrer einfachen Periodizität in azimuthaler Richtung sind sie vom Symmetriotyp  $E_{1g}$  bzw.  $E_{1u}$ .

Das Fundamentalgebiet wurde für alle vier Teilprobleme einheitlich mit einer Gitterschrittweite von einem Zehntel der Wellenlänge der Mode mit der höchsten Eigenfrequenz im interessierenden Bereich ( $h \approx 15$  mm) trianguliert, womit bei Wahl der  $D_{30h}$ -Gruppe als zugrunde liegende Symmetriegruppe insgesamt 233 Dreiecke resultieren. Die korrespondierenden diskreten Problemgrößen für die genannten Symmetrietypen sind in Tabelle 5.3 aufgelistet. Ohne Ausnutzung der geometrischen Symmetrie dieser Struktur würde die Anzahl der Freiheitsgrade  $N_{\text{tot}} = 41940$  betragen. Zur Lösung der nichtlinearen diskreten Eigenwertprobleme kam das Regula falsi-Verfahren zur Anwendung, das mit einem direkten Verfahren zur Bestimmung des kleinsten Eigenwertes des in jedem Iterationsschritt auszuwertenden linearisierten Eigenwertproblems kombiniert wurde. Die Startwerte wurden mittels einer Frequenzganganalyse des kleinsten Singulärwertes der diskreten Operatoren ermittelt. Es soll darauf hingewiesen werden, dass die Systemmatrizen des reduzierten Problems, die auf den diskreten Unterräumen vom Symmetriotyp  $E_{1g}$  und  $E_{1u}$  operieren, keine symmetrieentarteten Eigenräume besitzen, weil diese durch die Blockdiagonalisierung des Operators separiert werden. Die zu einer Eigenfrequenz gehörende nichttriviale Lösung des homogenen Systems, bestehend aus einer Symmetriekomponente und einem Entartungspartner, repräsentiert eine symmetrieadaptierte Orthogonalbasis des zweifach entarteten Eigenraums und damit ein Eigenwellenpaar. Demnach liefert die reduzierte Problemformulierung simultan eine vollständige Orthogonalbasis eines symmetrieentarteten Eigenraums.

In Tabelle 5.3 sind die nach der Zugehörigkeit der Eigenmoden zu den Symmetrietypen der  $D_{30h}$ -Gruppe aufgeschlüsselten Eigenfrequenzen der ersten drei Passbänder der TESLA-



	Monopol-Moden				Dipol-Moden			
	$A_{1g}$		$A_{1u}$		$E_{1g}$		$E_{1u}$	
$N_{\mathbf{R}}$	232		233		698		700	
$\nu$	$f$ in GHz	$\tau$ in ms	$f$ in GHz	$\tau$ in ms	$f$ in GHz	$\tau$ in ms	$f$ in GHz	$\tau$ in ms
1			1,28457	-37				
2	1,28688	-9,6						
3			1,29041	-4,6				
4	1,29479	-2,9						
5			1,29948	-2,2				
6	1,30395	-1,9						
7			1,30761	-1,9				
8	1,31005	-2,0						
9			1,31105	-1,6				
1					1,59963	0,55		
2							1,60870	0,55
3					1,62348	0,54		
4							1,64341	0,54
5					1,66773	0,53		
6							1,69541	0,51
7					1,72519	0,50		
8							1,75561	0,52
9					1,78645	0,61		
9							1,79907	0,48
8					1,83692	0,81		
7							1,85529	1,3
6					1,86971	3,1		
5							1,88028	31
4					1,88765	-15		
3							1,89246	-17
2					1,89538	-37		
1							1,89686	364

Tabelle 5.3: Numerisch ermittelte Eigenfrequenzen der ersten drei Passbänder der TESLA-Kavität. Diese sind nach der Zugehörigkeit der Eigenwellen zu den Symmetrietypen geordnet. Die diskrete Größe des dazu äquivalenten Gesamtproblems beträgt  $N_{\text{tot}} = 41940$ .

Kavität aufgelistet. Der Parameter  $\nu$  gibt die Vielfachheit von  $\pi/9$  im Phasenvorschub  $\varphi = \nu\pi/9$  pro Zelle der Eigenwellen in longitudinaler Richtung an. Die diskreten Integraloperatoren weisen die Besonderheit auf, dass ihre Eigenfrequenzen auch bei der Untersuchung abgeschlossener, verlustfreier Resonatorstrukturen einen kleinen imaginären Anteil beinhalten. Diese unphysikalische Dämpfung, die auch negativ sein und somit zu einer aufklingenden Eigenwelle führen kann, lässt sich ursächlich auf den Diskretisierungsprozess zurückführen und nimmt rasch mit steigender Güte der Approximation des Integraloperators ab. Es wurde beobachtet, dass auch die Genauigkeit der numerischen Integration zur Berechnung der Systemmatrix einen erheblichen Einfluss auf die Größe dieses Fehlers hat. Neben den Eigenfrequenzen sind in Tabelle 5.3 zusätzlich die Abklingkonstanten als Kehrwerte der Dämpfungen  $\tau = 1/\sigma$  angegeben.

# Kapitel 6

## Ausblick

Aufgrund der systematischen Aufbereitung und allgemein gehaltenen Darlegung des Konzepts der Symmetriezellenreduktion ist eine universelle Einsetzbarkeit nicht nur für weitere Randintegralgleichungen sondern generell für lineare Operatorgleichungen gewährleistet, insofern die in Abschnitt 4.1 angegebenen Voraussetzungen erfüllt sind. Der vorgestellte Formalismus zur Ableitung der Schnittkantenbedingung für stetige Feldgrößen und die numerische Umsetzung dieser Zusatzbedingung sind dabei ebenfalls auf Funktionen, an die stärkere Glattheitsforderungen gestellt sind, übertragbar. Daneben gibt es Erweiterungsmöglichkeiten, die im Folgenden kurz vorgestellt und diskutiert werden sollen.

### **Kombination mit Matrixkompressionsverfahren**

Bisher wurden zur Auswertung der linearen Gleichungssysteme stets direkte Verfahren herangezogen, wodurch sich trotz der reduzierten Problemgröße die praktische Nutzbarkeit auf elektrisch kleine Anordnungen beschränkt. Aus diesem Grund wäre die Einbindung symmetriereduzierender Verfahren in iterative Lösungskonzepte wünschenswert, wozu jedoch die Eignung der in Abschnitt 2.5 erwähnten Matrixkompressionsverfahren für die transformierten Integralgleichungen genau zu untersuchen wäre. Da anstelle der GREENSchen Freiraumfunktion ihre Symmetriekomponenten, die ähnliche analytische Eigenschaften besitzen, als Integralkerne auftreten, wird vermutlich der Einsetzbarkeit derartiger Beschleunigungsverfahren nichts im Wege stehen.

### **Beschleunigte Auswertung der modalen Funktionen**

Auch wenn der Speicherbedarf deutlich herabgesetzt und die zur numerischen Lösung des diskreten Problems benötigte Rechenzeit erheblich verkürzt werden kann, so ist jedoch kein nennenswerter Vorteil bei der Aufstellung der Impedanzmatrizen sowie der Fernfeldberechnung erkennbar. Ein weiterer wichtiger Forschungsschwerpunkt ist somit die Steigerung der Effizienz bei der numerischen Auswertung der modalen Funktionen, wozu möglicherweise bewährte Vorgehensweisen aus der algebraischen Symmetriereduktion als Vorbild dienen könnten [74].

### **Erweiterung auf nahezu symmetrische Anordnungen**

Praktische Anordnungen weisen häufig eine annähernde geometrische Symmetrie auf oder sind durch eine kleine Störung in einem sonst symmetrischen Aufbau, wie zum Beispiel durch die Einkoppler bei der TESLA-Kavität, gekennzeichnet. In [79] wurde eine auf der Symmetriereduktionsmethode aufbauende Möglichkeit zur Behandlung von elektro-

magnetischen Streuproblemen mit nahezu symmetrischen Objekten, bei denen jedoch das Fixpunktproblem nicht auftritt, vorgeschlagen. Die grundlegende Idee besteht darin, das gesamte Rechengebiet in einen symmetrischen und einen dazu komplementären Anteil aufzuspalten, um so eine entsprechende Partitionierung der Systemmatrix zu erreichen. Die Anwendung der verallgemeinerten FOURIER-Transformation auf das Gesamtsystem bewirkt eine Blockdiagonalisierung der das symmetrische Teilproblem beschreibenden Submatrix, womit deren Inversion oder LU-Zerlegung, die für die Lösung des gekoppelten Gleichungssystems unter Verwendung des SCHUR-Komplementverfahrens zwingend erforderlich ist, sehr effizient durchführbar ist. Eine Ausdehnung dieser Methodik auf den in dieser Arbeit hauptsächlich betrachteten Integralgleichungstyp (EFIE) ist denkbar, wodurch der Anwendungsbereich der Methode der Symmetriezellenreduktion erweitert werden könnte.

### Automatische Symmetriedetektion

Die Extraktion eines geeigneten Fundamentalgebiets aus einer in der Rechenpraxis gewöhnlich in Form eines CAD<sup>1</sup>-Modells vorliegenden geometrischen Struktur verlangt vom Anwender ein unzumutbar hohes Maß an gruppentheoretischem Vorwissen, weshalb eine vollständig automatisierte Bereitstellung der reduzierten Anordnung ein unverzichtbarer Bestandteil eines heutigen Simulationswerkzeugs sein sollte. Diese Vorverarbeitung umfasst im Einzelnen die folgenden Prozessschritte [82]:

- 1) Detektion zulässiger Symmetrieeoperationen,
- 2) Identifikation der vollen Symmetriegruppe,
- 3) Konstruktion eines Fundamentalgebiets,
- 4) Lokalisierung und Typisierung der Schnittränder.

Im Anschluss daran erfolgt die numerische Behandlung des Problems und die Aufbereitung der Ergebnisse, so dass der Vorgang der Symmetriereduktion vollständig im Hintergrund ablaufen kann. Es sei angemerkt, dass auch zur Realisierung der algebraischen Symmetriereduktionsmethode eine Symmetriezelle explizit bekannt sein muss, da das Funktionsprinzip zur Erzeugung eines symmetriegerechten Gitters auf der Vervielfachung eines diskretisierten Fundamentalgebiets mit Hilfe der Transformationen der Symmetriegruppe beruht [1]. Die zuverlässige und präzise Erkennung von Isometrien, die ein geometrisches Objekt auf sich abbilden, stellt ohne Zweifel die größte Herausforderung dar, wozu kürzlich von Wissenschaftlern aus dem Bereich der Computergrafik ein recht vielversprechender Algorithmus hoher Effizienz und Robustheit vorgeschlagen wurde [64]. Da alle praxisrelevanten, finiten Gruppen vollständig erfasst und analysiert sind, ist ein Rückschluss auf die Symmetriegruppe der Struktur aus Kenntnis der zulässigen Operationen eindeutig möglich. In Abschnitt 4.1.2 wurde bereits auf die formale Definition der Punkte eines Fundamentalgebietes hingewiesen, auf deren Grundlage ein passender Algorithmus zur Identifikation einer Symmetriezelle entwickelt werden könnte. Die möglichen Schnittränder werden durch die Symmetriegruppe der Struktur bestimmt. So verbleibt für diesen Schritt nur die Zuordnung der Randpunkte zu den einzelnen Typen, die beispielsweise unter Zuhilfenahme der Symmetrieelemente der zugehörigen Untergruppen erfolgen kann.

---

<sup>1</sup>Das Akronym CAD steht für „*Computer Aided Design*“

# Anhang A

## Analytische Auswertung spezieller Integrale

### A.1 Statische Selbstverkopplungsbeiträge

Bei Einsatz der in Abschnitt 2.4.2.1 beschriebenen Extraktionsmethode können für den Fall, dass Ansatz- und Testfunktionen einen identischen Träger besitzen, die abgespaltenen singulären Anteile der aus der GALERKIN-Diskretisierung des schwach singulären Integraloperators  $\mathcal{T}$  hervorgehenden Matrixbeiträge in geschlossener Form angegeben werden. Im Folgenden wird die Lösung dieser Integrale systematisch und übersichtlich für beliebige Extraktionsordnungen dargelegt, wobei sich der Einfachheit halber auf den durch RWG-Funktionen aufgespannten Randelementraum beschränkt wird. Eine Erweiterung auf Ansatzfunktionen höherer Polynomordnung ist uneingeschränkt möglich.

Alle auftretenden Integrale sind vierdimensional und besitzen die Gestalt

$$I^{(\mu)} = \frac{1}{4A^2} \int_T \int_T \left[ (\vec{r} - \vec{r}_i) \cdot (\vec{r}' - \vec{r}_j) - \frac{4}{k^2} \right] \|\vec{r} - \vec{r}'\|^{2\mu-1} dA(\vec{r}) dA(\vec{r}'), \quad \mu \in \mathbb{N}_0 \quad (\text{A.1.1})$$

mit einem von der gewählten Extraktionsordnung abhängigen Exponenten  $\mu$ , dem gemeinsamen Integrationsgebiet  $T = T_m^\pm = T_n^\pm$  sowie dessen Flächeninhalt  $A$ . Die freien Knoten der Ansatzfunktionen stimmen mit einem der drei Eckpunkte des Dreiecks  $T$  überein:  $\vec{r}_m^\pm = \vec{r}_i$ ,  $\vec{r}_n^\pm = \vec{r}_j$  mit  $i, j \in [1, 3]$ . Durch Einführung von Simplexkoordinaten

$$\vec{r} = \sum_{i=1}^3 \vec{r}_i \lambda_i \quad \sum_{i=1}^3 \lambda_i = 1 \quad dA(\vec{r}) = 2Ad\lambda_1 d\lambda_2 \quad (\text{A.1.2a})$$

$$\vec{r}' = \sum_{i=1}^3 \vec{r}_i \lambda'_i \quad \sum_{i=1}^3 \lambda'_i = 1 \quad dA(\vec{r}') = 2Ad\lambda'_1 d\lambda'_2 \quad (\text{A.1.2b})$$

zur Transformation des Integrationsgebietes  $T$  auf das Einheitsdreieck lässt sich Gleichung

chung (A.1.1) in der Form

$$I^{(\mu)} = \left( \vec{r}_{3i} \cdot \vec{r}_{3j} - \frac{4}{k^2} \right) I_{00}^{(\mu)} + (\vec{r}_{3i} \cdot \vec{r}_{13} + \vec{r}_{3j} \cdot \vec{r}_{13}) I_{01}^{(\mu)} + (\vec{r}_{3i} \cdot \vec{r}_{23} + \vec{r}_{3j} \cdot \vec{r}_{23}) I_{02}^{(\mu)} \\ + \|\vec{r}_{13}\|^2 I_{11}^{(\mu)} + \|\vec{r}_{23}\|^2 I_{22}^{(\mu)} + 2\vec{r}_{13} \cdot \vec{r}_{23} I_{12}^{(\mu)} \quad (\text{A.1.3})$$

schreiben. Hierin bezeichnet  $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$  den Vektor, der vom  $j$ -ten zum  $i$ -ten Eckpunkt des Dreiecks zeigt. Mit dieser Umformung ist eine Beschränkung auf die Auswertung der Basisintegrale

$$I_{ij}^{(\mu)} = \int_0^1 \int_0^{1-\lambda'_2} \int_0^1 \int_0^{1-\lambda_2} \lambda_i \lambda'_j \|\vec{r}_{13}(\lambda_1 - \lambda'_1) + \vec{r}_{23}(\lambda_2 - \lambda'_2)\|^{2\mu-1} d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda'_1 d\lambda'_2 \quad (\text{A.1.4})$$

mit  $i, j \in [0, 2]$  gegeben, wobei zum Zweck einer möglichst kompakten Schreibweise  $\lambda_0 = 1$  bzw.  $\lambda'_0 = 1$  gesetzt wurde. Eine deutliche Vereinfachung ergibt sich aus der Tatsache, dass zur Bestimmung sämtlicher Basisintegrale lediglich die vier Indexkombinationen  $(0, 0)$ ,  $(0, 1)$ ,  $(1, 1)$  sowie  $(1, 2)$  betrachtet werden müssen, da sich alle übrigen Fälle entweder aus der Eigenschaft  $I_{ij}^{(\mu)} = I_{ji}^{(\mu)}$  oder durch zyklische Vertauschung der Eckpunkte ergeben. Letztgenannte Eigenschaft folgt unmittelbar aus der Definition der Simplexkoordinaten gemäß Gleichung (A.1.2), wonach bei Permutation der Eckpunkte und der zugehörigen Koordinatenindizes das Integral unverändert bleibt.

Um die Rechnung übersichtlich und den Aufwand gering zu halten, bietet sich die im Abschnitt 2.4.2.2 behandelte regularisierende Koordinatentransformation an. Durch Übergang zu Relativkoordinaten nach EIBERT [34] und Vertauschen der Integrationsreihenfolge

$$u_i = \lambda_i - \lambda'_i \quad \lambda'_i = \lambda'_i \quad i \in [0, 2] \quad (\text{A.1.5})$$

wird die Singularität im Ursprung des Relativkoordinatensystems fixiert:

$$I_{ij}^{(\mu)} = \sum_{n=1}^6 \iint_{U_n} \iint_{\Lambda_n} (u_i + \lambda'_i) \lambda'_j \sqrt{\|\vec{r}_{13}\|^2 u_1^2 + 2\vec{r}_{13} \cdot \vec{r}_{23} u_1 u_2 + \|\vec{r}_{23}\|^2 u_2^2}^{2\mu-1} d\lambda'_1 d\lambda'_2 du_1 du_2. \quad (\text{A.1.6})$$

Die damit einhergehende Transformation des ursprünglichen Integrationsgebietes, das sich in sechs disjunkte Teilgebiete zerlegen lässt, ist in Abbildung A.1 für den Definitionsbereich der Relativkoordinaten veranschaulicht. Für die gestrichelten Simplexkoordinaten ergeben sich die zugehörigen Bereiche zu:

$$\begin{aligned} \Lambda_1(u_1, u_2) &= \{(\lambda'_1, \lambda'_2) : -u_1 \leq \lambda'_1 \leq 1 \wedge 0 \leq \lambda'_2 \leq 1 - \lambda'_1\}, \\ \Lambda_2(u_1, u_2) &= \{(\lambda'_1, \lambda'_2) : -u_1 \leq \lambda'_1 \leq 1 - u_1 - u_2 \wedge 0 \leq \lambda'_2 \leq 1 - \lambda'_1 - u_1 - u_2\}, \\ \Lambda_3(u_1, u_2) &= \{(\lambda'_1, \lambda'_2) : 0 \leq \lambda'_1 \leq 1 - u_1 - u_2 \wedge 0 \leq \lambda'_2 \leq 1 - \lambda'_1 - u_1 - u_2\}, \\ \Lambda_4(u_1, u_2) &= \{(\lambda'_1, \lambda'_2) : 0 \leq \lambda'_1 \leq 1 - u_1 \wedge -u_2 \leq \lambda'_2 \leq 1 - \lambda'_1 - u_1 - u_2\}, \\ \Lambda_5(u_1, u_2) &= \{(\lambda'_1, \lambda'_2) : 0 \leq \lambda'_1 \leq 1 + u_2 \wedge -u_2 \leq \lambda'_2 \leq 1 - \lambda'_1\}, \\ \Lambda_6(u_1, u_2) &= \{(\lambda'_1, \lambda'_2) : -u_1 \leq \lambda'_1 \leq 1 + u_2 \wedge -u_2 \leq \lambda'_2 \leq 1 - \lambda'_1\}. \end{aligned}$$

Zur Hebung der Punktsingularität sowie zur weiteren Vereinfachung des vierdimen-

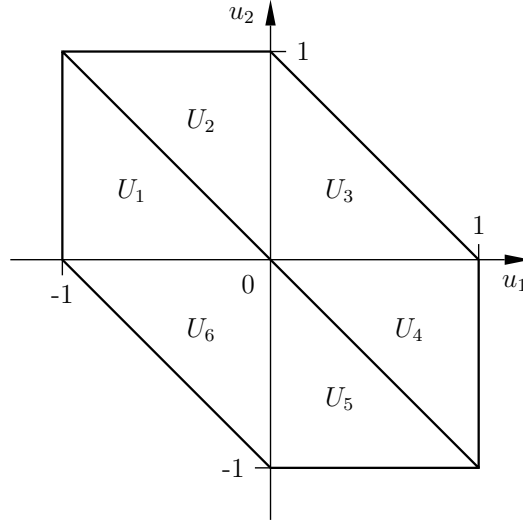


Abbildung A.1: *Definitionsbereich der Relativkoordinaten. Das transformierte Integrationsgebiet setzt sich aus sechs kongruenten Einheitsdreiecken zusammen.*

sionalen Integrals wird für jedes der dreieckigen Teilgebiete  $U_n$  eine geeignete DUFFY-Transformation  $u_i = u_{in}(\xi, \eta)$  angewendet, die Tabelle A.1 entnommen werden kann. Unter Berücksichtigung der JACOBI-Determinante der Transformation  $J_{u_1, u_2}(\xi, \eta) = \eta$  sowie der neuen Integrationsgrenzen, die aus der DUFFY-Transformation resultieren, nimmt das Integral schließlich die Gestalt

$$I_{ij}^{(\mu)} = \sum_{n=1}^6 \int_0^1 {}_n P_{ij}^{(\mu)}(\xi) \sqrt{\alpha_n \xi^2 + 2\beta_n \xi + \gamma_n}^{2\mu-1} d\xi \quad (\text{A.1.7})$$

an. Das Ergebnis der inneren dreidimensionalen Integration

$${}_n P_{ij}^{(\mu)}(\xi) = \int_0^1 \int_{\Lambda_n} [u_{in}(\eta, \xi) + \lambda'_i] \lambda'_j \eta^{2\mu} d\lambda'_1 d\lambda'_2 d\eta \quad (\text{A.1.8})$$

stellt ein Polynom ersten Grades in der Variablen  $\xi$  dar

$${}_n P_{ij}^{(\mu)}(\xi) = {}_n a_{ij}^{(\mu)} + {}_n b_{ij}^{(\mu)} \xi, \quad (\text{A.1.9})$$

dessen Koeffizienten sich auf einfache Weise durch Integration rationaler Funktionen ergeben. Unter Zuhilfenahme der Formel [22]

$$\int \xi R(\xi)^{2\mu-1} d\xi = \frac{R(\xi)^{2\mu+1}}{(2\mu+1)\alpha_n} - \frac{\beta_n}{\alpha_n} \int R(\xi)^{2\mu-1} d\xi, \quad R(\xi) = \sqrt{\alpha_n \xi^2 + 2\beta_n \xi + \gamma_n} \quad (\text{A.1.10})$$

kann das Integral über das lineare Monom auf ein Integral, welches ausschließlich Potenzen der Abstandsfunktion  $R(\xi)$  enthält, reduziert werden. Die Rekursionsbeziehung [22]

$$\int R(\xi)^{2\mu-1} d\xi = \frac{\alpha_n \xi + \beta_n}{2\mu \alpha_n} R(\xi)^{2\mu-1} + \frac{2\mu-1}{2\mu} \frac{\alpha_n \gamma_n - \beta_n^2}{\alpha_n} \int R(\xi)^{2\mu-3} d\xi, \quad \mu \geq 1 \quad (\text{A.1.11})$$

erlaubt schließlich die Umwandlung aller verbleibenden Ausdrücke in das elementare Integral  $I_n$  mit der Lösung

$$I_n = I_{n+3} := \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{\alpha_n \xi^2 + 2\beta_n \xi + \gamma_n}} d\xi = -\frac{1}{l_n} \ln \left| 1 - \frac{l_n}{s} \right|, \quad n \in \{1, 2, 3\}. \quad (\text{A.1.12})$$

Unabhängig von der gewählten Extraktionsordnung lässt sich das Gesamtergebn gemäß

n	1	4	2	5	3	6
$u_{0n}$	0	0	0	0	0	0
$u_{1n}$	$-\eta$	$\eta$	$-\eta\xi$	$\eta\xi$	$\eta\xi$	$-\eta\xi$
$u_{2n}$	$\eta\xi$	$-\eta\xi$	$\eta$	$-\eta$	$\eta(1-\xi)$	$-\eta(1-\xi)$
$\alpha_n$	$\ \vec{r}_{23}\ ^2$		$\ \vec{r}_{13}\ ^2$		$\ \vec{r}_{12}\ ^2$	
$\beta_n$	$-\vec{r}_{13} \cdot \vec{r}_{23}$		$-\vec{r}_{13} \cdot \vec{r}_{23}$		$\vec{r}_{12} \cdot \vec{r}_{23}$	
$\gamma_n$	$\ \vec{r}_{13}\ ^2$		$\ \vec{r}_{23}\ ^2$		$\ \vec{r}_{23}\ ^2$	

Tabelle A.1: Gewählte Koordinatentransformation sowie die sich ergebenden Koeffizienten des Integranden.

Gleichung (A.1.3) in Abhängigkeit von den Seitenlängen

$$l_1 = \|\vec{r}_{23}\|, \quad l_2 = \|\vec{r}_{13}\|, \quad l_3 = \|\vec{r}_{12}\| \quad (\text{A.1.13})$$

ausdrücken, wobei die auftretenden Skalarprodukte mittels des Cosinussatzes

$$\vec{r}_{ik} \cdot \vec{r}_{jk} = \frac{1}{2}(\|\vec{r}_{ik}\|^2 + \|\vec{r}_{jk}\|^2 - \|\vec{r}_{ij}\|^2) \quad (\text{A.1.14})$$

in die gewünschte Form gebracht werden können. Für eine kompakte und übersichtliche Darstellung bietet sich zudem die Einführung des Flächeninhaltes sowie des halben Dreiecksumfanges

$$A = \sqrt{s(s-l_1)(s-l_2)(s-l_3)} \quad (\text{A.1.15a})$$

$$s = \frac{1}{2}(l_1 + l_2 + l_3) \quad (\text{A.1.15b})$$

an. In Tabelle A.2 sind die für die doppelte Extraktion benötigten analytischen Ausdrücke für die Basisintegrale zusammenfassend dargestellt [78]. Ergebnisse für höhere Extraktionsordnungen oder höhere Ansatzfunktionen lassen sich leicht und effizient durch Auswertung von Gleichung (A.1.8) unter Zuhilfenahme eines Computeralgebrasystems generieren. Zu beachten ist, dass neben der Ausführung elementarer Operationen wie Additionen und Multiplikationen, bei denen nur Geometriegrößen des Dreiecks einfließen, lediglich drei voneinander unabhängige transzendente Funktionen berechnet werden müssen, wodurch der Aufwand zur analytischen Berechnung des singulären Anteils trotz kompliziert anmutender Ausdrücke im Vergleich zu dem der numerischen Auswertung der restlichen Integrale nicht ins Gewicht fällt.





## A.2 Regularisierte Selbstverkopplungsterme

Eine partielle analytische Auswertung der regularisierten Integrale in Abschnitt 2.4.2.2 ist möglich und soll nachfolgend skizziert werden. Zur Vereinfachung der weiteren Rechnung werden folgende Abkürzungen eingeführt:

$$\begin{aligned} c_0 &= \vec{r}_{i1} \cdot \vec{r}'_{j1} - \frac{4}{k^2}, & c_1 &= \vec{r}_{i1} \cdot \vec{r}'_{12}, & c_2 &= \vec{r}_{i1} \cdot \vec{r}'_{23}, \\ c_3 &= \vec{r}_{12} \cdot \vec{r}'_{j1}, & c_4 &= \vec{r}_{23} \cdot \vec{r}'_{j1}, & c_5 &= \vec{r}_{12} \cdot \vec{r}'_{12}, \\ c_6 &= \vec{r}_{23} \cdot \vec{r}'_{12}, & c_7 &= \vec{r}_{12} \cdot \vec{r}'_{23}, & c_8 &= \vec{r}_{23} \cdot \vec{r}'_{23}. \end{aligned}$$

Nachfolgend muss zwischen den in Abschnitt 2.4.2.2 genannten Fällen unterschieden werden.

### Gemeinsamer Punkt

Unter Beachtung, dass  $\vec{r}'_1 = \vec{r}'_1$  ist, folgt nach Einführung von

$$\xi v_{ji}(\eta_1, \eta_2, \eta_3) := u_{ji}(\xi, \eta_1, \eta_2, \eta_3), \quad j \in [1, 4], \quad i \in [1, 2] \quad (\text{A.2.1})$$

und

$$\hat{R}_i(\eta_1, \eta_2, \eta_3) := \|\vec{r}_{12}v_{1i} + \vec{r}_{23}v_{2i} - \vec{r}'_{12}v_{3i} - \vec{r}'_{23}v_{4i}\| \quad (\text{A.2.2})$$

für die Abstandsfunktion  $R(\vec{r}, \vec{r}') = \xi \hat{R}_i(\eta_1, \eta_2, \eta_3)$ . Das in Gleichung (2.4.22) auftretende Integral reduziert sich damit auf die numerische Auswertung des Ausdrucks

$$\underline{Z}_{mn}^{\pm\pm} = jkZ_0 \frac{l_m^{\pm} l_n^{\pm}}{4\pi} \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \sum_{i=1}^2 \sum_{\mu=1}^3 \frac{a_i^{(\mu)}(\eta_1, \eta_2, \eta_3)}{\hat{R}_i(\eta_1, \eta_2, \eta_3)} \underline{I}_i^{(\mu)}(\eta_1, \eta_2, \eta_3) \eta_2 d\eta_1 d\eta_2 d\eta_3. \quad (\text{A.2.3})$$

Das hierin enthaltene eindimensionale Integral

$$\underline{I}_i^{(\mu)}(\eta_1, \eta_2, \eta_3) = \int_0^1 \xi^{\mu+1} \exp[-jk\xi \hat{R}_i(\eta_1, \eta_2, \eta_3)] d\xi, \quad 1 \leq \mu \leq 3 \quad (\text{A.2.4})$$

besitzt eine einfache geschlossene Lösung der Gestalt

$$\begin{aligned} \underline{I}_i^{(1)} &= \frac{je^{-jk\hat{R}_i}}{k\hat{R}_i} + \frac{2e^{-jk\hat{R}_i}}{k^2\hat{R}_i^2} + \frac{2j - 2je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3\hat{R}_i^3}, \\ \underline{I}_i^{(2)} &= \frac{je^{-jk\hat{R}_i}}{k\hat{R}_i} + \frac{3e^{-jk\hat{R}_i}}{k^2\hat{R}_i^2} - \frac{6je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3\hat{R}_i^3} + \frac{6 - 6e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4\hat{R}_i^4}, \\ \underline{I}_i^{(3)} &= \frac{je^{-jk\hat{R}_i}}{k\hat{R}_i} + \frac{4e^{-jk\hat{R}_i}}{k^2\hat{R}_i^2} - \frac{12je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3\hat{R}_i^3} - \frac{24e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4\hat{R}_i^4} + \frac{-24j + 24je^{-jk\hat{R}_i}}{k^5\hat{R}_i^5}. \end{aligned}$$

Die Koeffizienten ergeben sich nach Auswertung des Skalarprodukts und mit Hilfe von Tabelle 2.2 zu:

$$\begin{aligned} a_1^{(1)} &= c_0, & a_2^{(1)} &= c_0, \\ a_1^{(2)} &= c_1\eta_2 + c_2\eta_2\eta_3 + c_3 + c_4\eta_1, & a_2^{(2)} &= c_1 + c_2\eta_1 + c_3\eta_2 + c_4\eta_2\eta_3, \end{aligned}$$

$$a_1^{(3)} = c_5\eta_2 + c_6\eta_1\eta_2 + c_7\eta_2\eta_3 + c_8\eta_1\eta_2\eta_3, \quad a_2^{(3)} = c_5\eta_2 + c_6\eta_2\eta_3 + c_7\eta_1\eta_2 + c_8\eta_1\eta_2\eta_3.$$

### Gemeinsame Kante

Unter Beachtung, dass  $\vec{r}_1 = \vec{r}'_1$  und  $\vec{r}_2 = \vec{r}'_2$  ist, folgt nach Einführung von

$$\xi\eta_1 v_{ji}(\eta_2, \eta_3) := u_{ji}(\xi, \eta_1, \eta_2, \eta_3), \quad j \in [1, 3], \quad i \in [1, 5] \quad (\text{A.2.5})$$

und

$$\hat{R}_i(\eta_2, \eta_3) := \|\vec{r}'_{12}v_{1i} + \vec{r}'_{23}v_{2i} - \vec{r}_{23}v_{3i}\| \quad (\text{A.2.6})$$

für die Abstandsfunktion  $R(\vec{r}, \vec{r}') = \xi\eta_1 \hat{R}_i(\eta_2, \eta_3)$ . Das in Gleichung (2.4.24) auftretende Integral reduziert sich mit

$$\hat{J}_i(\eta_2) = \begin{cases} 1 & , \quad i = 1 \\ \eta_2 & , \quad i \in [2, 5] \end{cases} \quad (\text{A.2.7})$$

auf die numerische Auswertung des Ausdrucks

$$\underline{Z}_{mn}^{\pm\pm} = jkZ_0 \frac{l_m^{\pm} l_n^{\pm}}{4\pi} \int_0^1 \int_0^1 \sum_{i=1}^5 \sum_{\mu=1}^3 \sum_{\nu=1}^{\mu} \frac{a_i^{(\mu\nu)}(\eta_2, \eta_3)}{\hat{R}_i(\eta_2, \eta_3)} \underline{I}_i^{(\mu\nu)}(\eta_2, \eta_3) \hat{J}_i(\eta_2) d\eta_2 d\eta_3. \quad (\text{A.2.8})$$

Das hierin enthaltene zweidimensionale Integral

$$\underline{I}_i^{(\mu\nu)}(\eta_2, \eta_3) = \int_0^1 \int_0^1 \xi^{\mu+1} \eta_1^{\nu} \exp[-jk\xi\eta_1 \hat{R}_i(\eta_2, \eta_3)] d\eta_1 d\xi, \quad \begin{matrix} 1 \leq \mu \leq 3 \\ 1 \leq \nu \leq \mu \end{matrix} \quad (\text{A.2.9})$$

besitzt eine einfache geschlossene Lösung der Gestalt

$$\begin{aligned} \underline{I}_i^{(11)} &= \frac{-1 - e^{-jk\hat{R}_i}}{k^2 \hat{R}_i^2} + \frac{-2j + 2je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3 \hat{R}_i^3}, \\ \underline{I}_i^{(21)} &= \frac{-\frac{1}{2} - e^{-jk\hat{R}_i}}{k^2 \hat{R}_i^2} + \frac{3je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3 \hat{R}_i^3} + \frac{-3 + 3e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4 \hat{R}_i^4}, \\ \underline{I}_i^{(22)} &= \frac{2j + 4je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3 \hat{R}_i^3} - \frac{e^{-jk\hat{R}_i}}{k^2 \hat{R}_i^2} + \frac{-6 + 6e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4 \hat{R}_i^4}, \\ \underline{I}_i^{(31)} &= \frac{-\frac{1}{3} - e^{-jk\hat{R}_i}}{k^2 \hat{R}_i^2} + \frac{4je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3 \hat{R}_i^3} + \frac{8e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4 \hat{R}_i^4} + \frac{8j - 8je^{-jk\hat{R}_i}}{k^5 \hat{R}_i^5}, \\ \underline{I}_i^{(32)} &= \frac{j + 5je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3 \hat{R}_i^3} - \frac{e^{-jk\hat{R}_i}}{k^2 \hat{R}_i^2} + \frac{12e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4 \hat{R}_i^4} + \frac{12j - 12je^{-jk\hat{R}_i}}{k^5 \hat{R}_i^5}, \\ \underline{I}_i^{(33)} &= \frac{24j - 24je^{-jk\hat{R}_i}}{k^5 \hat{R}_i^5} - \frac{e^{-jk\hat{R}_i}}{k^2 \hat{R}_i^2} + \frac{6je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3 \hat{R}_i^3} + \frac{6 + 18e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4 \hat{R}_i^4}. \end{aligned}$$

Die Koeffizienten ergeben sich mit Hilfe von Tabelle 2.3 zu:

$$\begin{aligned} a_i^{(11)} &= c_0, \quad i \in [1, 5], & a_i^{(21)} &= c_1 + c_3, \quad i \in [1, 5], \\ a_1^{(22)} &= c_2(1 - \eta_2) - c_1\eta_2 + c_4\eta_3, & a_2^{(22)} &= c_4 - c_1\eta_2\eta_3 + c_2(\eta_2 - \eta_2\eta_3), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_3^{(22)} &= c_4(1 - \eta_2) - c_3\eta_2 + c_2\eta_2\eta_3, & a_4^{(22)} &= c_2 - c_3\eta_2\eta_3 + c_4(\eta_2 - \eta_2\eta_3), \\
a_5^{(22)} &= c_2\eta_2 - c_3\eta_2\eta_3 + c_4(1 - \eta_2\eta_3), & a_i^{(31)} &= c_5, \quad i \in [1, 5], \\
a_1^{(32)} &= c_7(1 - \eta_2) - c_5\eta_2 + c_6\eta_3, & a_2^{(32)} &= c_6 - c_5\eta_2\eta_3 + c_7(\eta_2 - \eta_2\eta_3), \\
a_3^{(32)} &= c_6(1 - \eta_2) - c_5\eta_2 + c_7\eta_2\eta_3, & a_4^{(32)} &= c_7 - c_5\eta_2\eta_3 + c_6(\eta_2 - \eta_2\eta_3), \\
a_5^{(32)} &= c_7\eta_2 - c_5\eta_2\eta_3 + c_6(1 - \eta_2\eta_3), & a_1^{(33)} &= c_8(1 - \eta_2)\eta_3 - c_6\eta_2\eta_3, \\
a_2^{(33)} &= c_8\eta_2(1 - \eta_3) - c_6\eta_2\eta_3, & a_3^{(33)} &= c_8(1 - \eta_2)\eta_2\eta_3 - c_7\eta_2^2\eta_3, \\
a_4^{(33)} &= c_8\eta_2(1 - \eta_3) - c_7\eta_2\eta_3, & a_5^{(33)} &= c_8\eta_2(1 - \eta_2\eta_3) - c_7\eta_2^2\eta_3.
\end{aligned}$$

### Identische Dreiecke

Unter Beachtung, dass  $\vec{r}_1 = \vec{r}'_1$ ,  $\vec{r}_2 = \vec{r}'_2$  und  $\vec{r}_3 = \vec{r}'_3$  ist, folgt nach Einführung von

$$\xi\eta_1\eta_2v_{ji}(\eta_3) := u_{ji}(\xi, \eta_1, \eta_2, \eta_3), \quad j \in [1, 2], \quad i \in [1, 3] \quad (\text{A.2.10})$$

und

$$\hat{R}_i(\eta_3) := \|\vec{r}_{12}v_{1i} + \vec{r}_{23}v_{2i}\| \quad (\text{A.2.11})$$

für die Abstandsfunktion  $R(\vec{r}, \vec{r}') = \xi\eta_1\eta_2\hat{R}_i(\eta_3)$ . Das in Gleichung (2.4.26) auftretende Integral reduziert sich damit auf die numerische Auswertung des Ausdrucks

$$\underline{Z}_{mn}^{\pm\pm} = jkZ_0 \frac{l_m^\pm l_n^\pm}{4\pi} \int_0^1 \sum_{i=1}^3 \sum_{\mu=1}^3 \sum_{\nu=1}^\mu \sum_{\kappa=1}^\nu \frac{a_i^{(\mu\nu\kappa)}(\eta_3)}{\hat{R}_i(\eta_3)} \underline{I}_i^{(\mu\nu\kappa)}(\eta_3) d\eta_3. \quad (\text{A.2.12})$$

Das hierin enthaltene dreidimensionale Integral

$$\underline{I}_i^{(\mu\nu\kappa)}(\eta_3) = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \xi^{\mu+1} \eta_1^\nu \eta_2^{\kappa-1} \exp[-jk\xi\eta_1\eta_2\hat{R}_i(\eta_3)] d\eta_2 d\eta_1 d\xi, \quad \begin{matrix} 1 \leq \mu \leq 3 \\ 1 \leq \nu \leq \mu \\ 1 \leq \kappa \leq \nu \end{matrix} \quad (\text{A.2.13})$$

besitzt eine einfache geschlossene Lösung der Gestalt

$$\begin{aligned}
\underline{I}_i^{(111)} &= \frac{j - je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3\hat{R}_i^3} - \frac{j}{2k\hat{R}_i} + \frac{1}{k^2\hat{R}_i^2}, \\
\underline{I}_i^{(211)} &= \frac{1 - e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4\hat{R}_i^4} - \frac{j}{3k\hat{R}_i} + \frac{1}{2k^2\hat{R}_i^2} - \frac{je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3\hat{R}_i^3}, \\
\underline{I}_i^{(221)} &= \frac{2 - 2e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4\hat{R}_i^4} - \frac{j}{6k\hat{R}_i} + \frac{-j - je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3\hat{R}_i^3}, \\
\underline{I}_i^{(222)} &= \frac{3 - 3e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4\hat{R}_i^4} - \frac{1}{2k^2\hat{R}_i^2} + \frac{-2j - je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3\hat{R}_i^3}, \\
\underline{I}_i^{(311)} &= \frac{-2j + 2je^{-jk\hat{R}_i}}{k^5\hat{R}_i^5} - \frac{j}{4k\hat{R}_i} + \frac{1}{3k^2\hat{R}_i^2} - \frac{je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3\hat{R}_i^3} - \frac{2e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4\hat{R}_i^4}, \\
\underline{I}_i^{(321)} &= \frac{-\frac{j}{2} - je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3\hat{R}_i^3} - \frac{j}{8k\hat{R}_i} - \frac{3e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4\hat{R}_i^4} + \frac{-3j + 3je^{-jk\hat{R}_i}}{k^5\hat{R}_i^5},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\underline{I}_i^{(322)} &= \frac{-j - je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3\hat{R}_i^3} - \frac{1}{3k^2\hat{R}_i^2} - \frac{4e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4\hat{R}_i^4} + \frac{-4j + 4je^{-jk\hat{R}_i}}{k^5\hat{R}_i^5}, \\
\underline{I}_i^{(331)} &= \frac{-2 - 4e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4\hat{R}_i^4} - \frac{j}{12k\hat{R}_i} - \frac{je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3\hat{R}_i^3} + \frac{-6j + 6je^{-jk\hat{R}_i}}{k^5\hat{R}_i^5}, \\
\underline{I}_i^{(332)} &= \frac{-3 - 5e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4\hat{R}_i^4} - \frac{1}{6k^2\hat{R}_i^2} - \frac{je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3\hat{R}_i^3} + \frac{-8j + 8je^{-jk\hat{R}_i}}{k^5\hat{R}_i^5}, \\
\underline{I}_i^{(333)} &= \frac{-6 - 6e^{-jk\hat{R}_i}}{k^4\hat{R}_i^4} + \frac{j - je^{-jk\hat{R}_i}}{k^3\hat{R}_i^3} + \frac{-12j + 12je^{-jk\hat{R}_i}}{k^5\hat{R}_i^5}.
\end{aligned}$$

Die Koeffizienten ergeben sich mit Hilfe von Tabelle 2.4 zu:

$$\begin{aligned}
a_i^{(111)} &= 2c_0, \quad i \in [1, 3], & a_1^{(211)} &= 2(c_1 + c_3), \\
a_2^{(211)} &= 2(c_1 + c_2 + c_3 + c_4), & a_3^{(211)} &= 2(c_1 + c_3), \\
a_1^{(221)} &= 2(c_2 + c_4), & a_2^{(221)} &= -2(c_2 + c_4), \\
a_3^{(221)} &= 2(c_2 + c_4), & a_1^{(222)} &= (c_2 + c_4)(\eta_3 - 2) - (c_1 + c_3), \\
a_2^{(222)} &= c_2 + c_4 - (c_1 + c_3)\eta_3, & a_3^{(222)} &= -(c_2 + c_4)(1 + \eta_3) - (c_1 + c_3)\eta_3, \\
a_1^{(311)} &= 2c_5, & a_2^{(311)} &= 2(c_5 + c_6 + c_7 + c_8), \\
a_3^{(311)} &= 2c_5, & a_1^{(321)} &= 2(c_6 + c_7), \\
a_2^{(321)} &= -2(c_6 + c_7 + 2c_8), & a_3^{(321)} &= 2(c_6 + c_7), \\
a_1^{(322)} &= (c_6 + c_7)(\eta_3 - 2) - 2c_5, & a_2^{(322)} &= 2c_8 + (c_6 + c_7)(1 - \eta_3) - 2c_5\eta_3, \\
a_3^{(322)} &= -(c_6 + c_7)(1 + \eta_3) - 2c_5\eta_3, & a_i^{(331)} &= 2c_8, \quad i \in [1, 3], \\
a_1^{(332)} &= c_8(2\eta_3 - 4) - (c_6 + c_7), & a_2^{(332)} &= (c_6 + c_7)\eta_3 - 2c_8, \\
a_3^{(332)} &= -(c_6 + c_7)\eta_3 - 2c_8(1 + \eta_3), & a_1^{(333)} &= (c_6 + c_7 + 2c_8)(1 - \eta_3), \\
a_2^{(333)} &= -(c_6 + c_7)\eta_3, & a_3^{(333)} &= (c_6 + c_7 + 2c_8)\eta_3.
\end{aligned}$$

Es sei angemerkt, dass in den analytischen Lösungen der inneren Integrale neben der komplexen Exponentialfunktion nur Potenzen von der Abstandsfunktion auftreten. Die transzendente Funktion muss für jedes Teilgebiet nur einmal ausgewertet werden, so dass bei einer geschickten Implementierung der Integrandenfunktionen der durch die Dimensionsreduktion der Integrale erreichbare Rechenzeitgewinn selbst bei geringer Stützstellenzahl überwiegt.



## Anhang B

# Eigenschaften ausgewählter Punktsymmetriegruppen

Die Ausnutzung geometrischer Symmetrien in der numerischen Feldberechnung erfordert ein ausreichendes Verständnis der zugrunde liegenden Symmetriegruppen, um zum einen diese bei Vorliegen einer konkreten Problemstellung überhaupt identifizieren zu können und zum anderen die für den Einsatz der vorgestellten Verfahren benötigten Elemente zur Verfügung zu haben.

Nachfolgend sind alle wichtigen Eigenschaften sowie die vollständigen Sätze der inäquivalenten, irreduziblen Darstellungen ausgewählter praxisrelevanter Punktsymmetriegruppen zusammenfassend aufgeführt. Die Bezeichnung dieser konkreten Realisierungen abstrakter Gruppen und der Symmetrioperationen orientiert sich hierbei an der aus der Kristallografie stammenden SCHÖNFLIES-Notation. Die Benennung der Darstellungen und damit der Symmetrietypen erfolgt auf Basis der MULLIKEN-Symbolik. Mehr Details sowie weitere Gruppen finden sich in der Spezialliteratur [13, 93, 62, 48].

## B.1 Die Gruppe $C_n$

Die zur abstrakten zyklischen Gruppe  $Z_n$  isomorphe Gruppe  $C_n$  ist abelsch und besitzt eine Hauptdrehachse der Zähligkeit  $n$  [13]. Geometrische Strukturen, die eine diskrete Drehsymmetrie aufweisen, können damit charakterisiert werden. Als Gruppenelemente treten auf:

- $n$  Drehungen  $C_n^\mu$ ,  $\mu \in [1, n]$ .

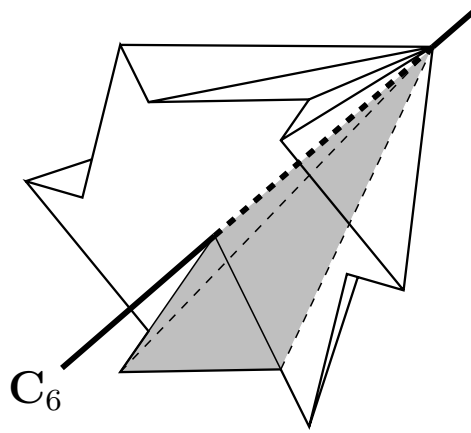


Abbildung B.1: Beispielhafte geometrische Struktur mit  $C_6$ -Symmetrie. Eingezeichnet ist die Hauptdrehachse  $C_6$  als einziges Symmetrieelement des minimalen Erzeugendensystems. Ein mögliches Fundamentalgebiet dieses Körpers ist dunkelgrau hervorgehoben.

Damit beträgt die Gruppenordnung

$$|C_n| = n. \quad (\text{B.1.1})$$

Diese Gruppe wird aus einem einzigen Element

$$C_n = \langle C_n \rangle \quad (\text{B.1.2})$$

mit der definierenden Relation

$$C_n^n = E$$

erzeugt. Jedes Element formt eine Klasse für sich, womit die zyklische Gruppe in

$$N_{\text{kl}} = n \quad (\text{B.1.3})$$

Klassen zerfällt. Der vollständige Satz der inäquivalenten, irreduziblen Darstellungen ist in Tabelle B.1 in übersichtlicher Form präsentiert. Sämtliche Darstellungen dieser kommutativen Gruppen sind zwar eindimensional, die paarweise zueinander konjugiert komplexen Darstellungen werden jedoch gewöhnlich zu einer vom Typ  $E$  zusammengefasst [62].



$n = 2$	$n$ gerade	$n$ ungerade	$C_n^\mu$
$A$	$A$	$A$	1
$B$	$B$		$(-1)^\mu$
	$E_m$	$E_m$	$\exp(\pm j\alpha m \mu)$
	$m \in [1, \frac{n}{2} - 1]$	$m \in [1, \frac{n-1}{2}]$	$\mu \in [1, n], \alpha = \frac{2\pi}{n}$

Tabelle B.1: *Vollständiger Satz inäquivalenter, irreduzibler Darstellungen der Punktsymmetriegruppe  $C_n$ . Da diese Gruppe abelsch ist, sind alle Darstellungen eindimensional.*

## B.2 Die Gruppe $C_{nh}$

Die abelsche Gruppe  $C_{nh}$  besitzt eine  $n$ -zählige Hauptdrehachse und eine dazu senkrechte Spiegelebene [13]. Als Gruppenelemente treten auf:

- $n$  Drehungen  $C_n^\mu$ ,  $\mu \in [1, n]$ ,
- $n$  Drehspiegelungen  $S_n^{(\mu)} = \sigma_h C_n^\mu$ ,  $\mu \in [1, n]$ .

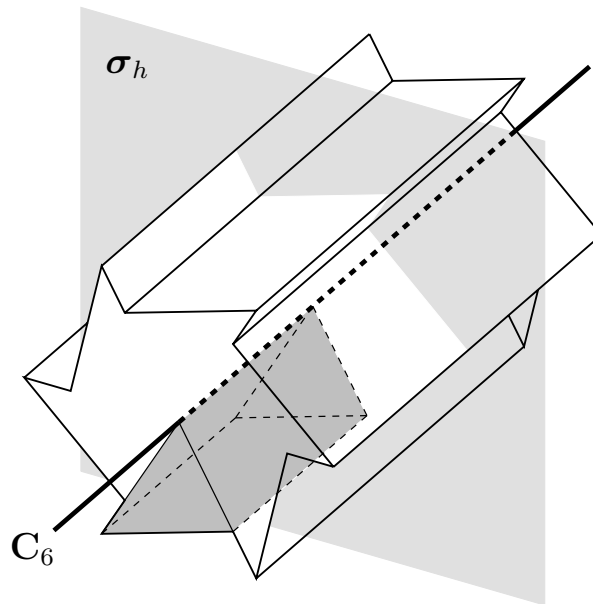


Abbildung B.2: *Beispielhafte geometrische Struktur mit  $C_{6h}$ -Symmetrie. Eingezeichnet sind die Hauptdrehachse  $C_6$  und die dazu senkrechte Spiegelebene  $\sigma_h$  als Symmetrieelemente des minimalen Erzeugendensystems. Ein mögliches Fundamentalgebiet dieses Körpers ist dunkelgrau hervorgehoben.*

Damit beträgt die Gruppenordnung

$$|C_{nh}| = 2n. \quad (\text{B.2.1})$$

Mit dem minimalen Erzeugendensystem

$$C_n = \langle C_n, \sigma_h \rangle \quad (\text{B.2.2})$$

und den definierenden Relationen

$$\begin{aligned} C_n^m &= E, & C_n \sigma_h &= \sigma_h C_n, \\ \sigma_h^2 &= E \end{aligned}$$

ist diese Gruppe eindeutig erklärt. Für die Anzahl konjugierter Klassen gilt:

$$N_{\text{kl}} = 2n. \quad (\text{B.2.3})$$

Der vollständige Satz der inäquivalenten, irreduziblen Darstellungen ist in Tabelle B.2 in übersichtlicher Form präsentiert. Im Übrigen sei hier auf die Anmerkung im vorigen Abschnitt zur Gruppe  $C_n$  verwiesen.

$n = 2$	$n$ gerade	$n$ ungerade	$C_n^\mu$	$S_n^{(\mu)}$
$A_g$	$A_g$	$A'$	1	1
$A_u$	$A_u$	$A''$	1	-1
$B_u$	$B_g/B_u$		$(-1)^\mu$	$(-1)^\mu$
$B_g$			$(-1)^\mu$	$-(-1)^\mu$
	$E_{mg}/E_{mu}$	$E'_m$	$\exp(\pm j\alpha m \mu)$	$\exp(\pm j\alpha m \mu)$
		$E''_m$	$\exp(\pm j\alpha m \mu)$	$-\exp(\pm j\alpha m \mu)$
	$m \in [1, \frac{n}{2} - 1]$	$m \in [1, \frac{n-1}{2}]$	$\mu \in [1, n], \alpha = \frac{2\pi}{n}$	

Tabelle B.2: Vollständiger Satz inäquivalenter, irreduzibler Darstellungen der Punktgruppe  $C_{nh}$ . Da diese Gruppe abelsch ist, sind alle Darstellungen eindimensional.

### B.3 Die Gruppe $C_{nv}$

Die zur  $n$ -ten Diedergruppe isomorphe Gruppe  $C_{nv}$  besitzt eine  $n$ -zählige Drehachse  $C_n$  sowie  $n$  Spiegelebenen  $\sigma_v^{(n)}$ , welche die Hauptdrehachse enthalten [13]. Diese Gruppe ist für  $n > 2$  nicht-abelsch und beschreibt unter anderem die höchste Symmetrie der regelmäßigen  $n$ -eckigen Pyramide. Folgende Gruppenelemente treten auf:

- $n$  Drehungen  $C_n^\mu$ ,  $\mu \in [1, n]$ ,
- $n$  Spiegelungen  $\sigma_v^{(\mu)} = \sigma_v C_n^\mu$ ,  $\mu \in [1, n]$ .

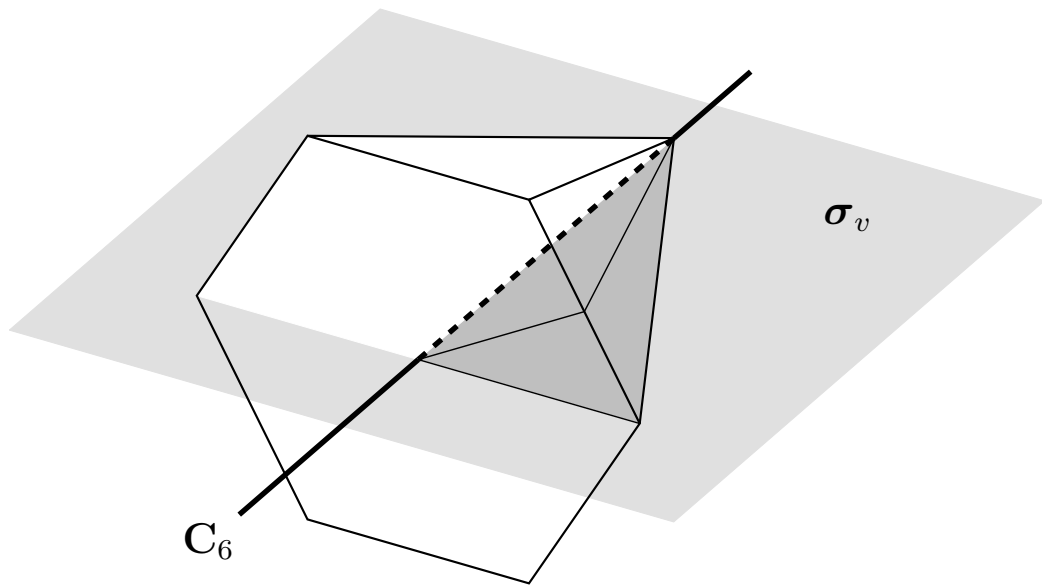


Abbildung B.3: Regelmäßige 6-eckige Pyramide als Beispiel eines geometrischen Objektes mit  $C_{6v}$ -Symmetrie. Eingezeichnet sind die Symmetrieelemente des Erzeugendensystems: die Hauptdrehachse  $C_6$  sowie die vertikale Spiegelebene  $\sigma_v$ . Ein mögliches Fundamentalgebiet dieses Körpers ist dunkelgrau hervorgehoben.

Daraus folgt sofort, dass die Gruppenordnung

$$|C_{nv}| = 2n \quad (\text{B.3.1})$$

beträgt. Aus dem minimalen Erzeugendensystem

$$C_{nv} = \langle C_n, \sigma_v \rangle, \quad (\text{B.3.2})$$

bestehend aus der Drehung  $C_n$  um den Winkel  $\frac{2\pi}{n}$  und der Spiegelung  $\sigma_v$  an einer vertikalen Ebene, lassen sich in Verbindung mit den definierenden Relationen

$$\begin{aligned} C_n^n &= E, & C_n \sigma_v &= \sigma_v C_n^{-1}, \\ \sigma_v^2 &= E \end{aligned}$$

sämtliche Gruppenelemente ableiten sowie die Gruppentafel konstruieren. Abbildung B.3 zeigt eine 6-eckige, regelmäßige Pyramide als ein Vertreter von geometrischen Strukturen

mit  $C_{6v}$ -Symmetrie. Neben den erzeugenden Elementen ist auch ein Fundamentalgebiet eingezeichnet. Von besonderem Interesse sind die Sequenzen zueinander konjugierter Elemente, da diese die Basis für die Zerlegung in Symmetrieklassen bilden. Für ungerades  $n$  werden alle Spiegelebenen  $\sigma_v^{(\mu)}$  durch die Drehung  $C_n^\nu$  ineinander übergeführt und bilden in ihrer Gesamtheit eine Klasse. Jede Drehung  $C_n^\nu$  mit  $\nu \in [1, \frac{n-1}{2}]$  gehört zusammen mit ihrer Inversen  $C_n^{-\nu}$  einer eigenen Klasse an. Ist  $n$  gerade, zerfallen die Spiegelsymmetrioperationen in zwei Klassen, da die Spiegelebenen  $\sigma_v^{(2\mu)}$  sowie die Spiegelebenen  $\sigma_v^{(2\mu-1)}$  mit  $\mu \in [1, \frac{n}{2}]$  durch die Drehung  $C_n^\nu$  ineinander übergeführt werden. Des Weiteren bildet jede Drehung  $C_n^\nu$  für  $\nu \in [1, \frac{n}{2} - 1]$  zusammen mit  $C_n^{-\nu}$  sowie das einzelne Element  $C_n^{\frac{n}{2}}$  jeweils eine Klasse [13]. Unter Hinzunahme des Einselements, das stets eine Klasse für sich bildet und wegen  $C_n^n = E$  als Sonderfall der eigentlichen Drehung um die Hauptachse angesehen werden kann, ergibt sich die Klassenzahl somit zu:

$$N_{\text{kl}} = \begin{cases} \frac{n}{2} + 3; & n \text{ gerade} \\ \frac{n+3}{2}; & n \text{ ungerade} \end{cases}. \quad (\text{B.3.3})$$

In Tabelle B.3 ist der vollständige Satz der inäquivalenten, irreduziblen Darstellungen zusammengestellt [20, 19]. Für diese Gruppe existieren ebenfalls reelle, irreduzible Darstellungen, die sich leicht durch eine unitäre Ähnlichkeitstransformation

$$\mathbf{M}_m \sim \mathbf{U} \mathbf{M}_m \mathbf{U}^H = \begin{pmatrix} \cos(\alpha m) & -\sin(\alpha m) \\ \sin(\alpha m) & \cos(\alpha m) \end{pmatrix}, \quad \text{mit } \mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -j \\ -j & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.3.4})$$

gewinnen lassen.

$n = 2$	$n$ gerade	$n$ ungerade	$C_n^\mu$	$\sigma_v^{(\mu)}$
$A_1$	$A_1$	$A_1$	1	1
$A_2$	$A_2$	$A_2$	1	-1
$B_1$	$B_1$		$(-1)^\mu$	$(-1)^\mu$
$B_2$	$B_2$		$(-1)^\mu$	$-(-1)^\mu$
	$E_m$	$E_m$	$\mathbf{M}_m^\mu$	$\mathbf{PM}_m^\mu$
	$m \in [1, \frac{n}{2} - 1]$	$m \in [1, \frac{n-1}{2}]$	$\mu \in [1, n]$	
$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{M}_m = \begin{pmatrix} \exp(j\alpha m) & 0 \\ 0 & \exp(-j\alpha m) \end{pmatrix}, \alpha = \frac{2\pi}{n}$				

Tabelle B.3: Vollständiger Satz inäquivalenter, irreduzibler Darstellungen der Punktgruppe  $C_{nv}$ . Für ungerades  $n$  sind 2, für gerades  $n$  hingegen 4 eindimensionale irreduzible Darstellungen vorhanden. Alle restlichen Darstellungen sind für  $n > 2$  zweidimensional.

## B.4 Die Gruppe $D_{nh}$

Die höchste Symmetrie des regelmäßigen  $n$ -eckigen Prismas lässt sich durch die nicht-abelsche Gruppe  $D_{nh}$  beschreiben, die eine  $n$ -zählige Hauptdrehachse  $\mathbf{C}_n$ ,  $n$  dazu orthogonale  $\mathbf{C}_2$ -Achsen und eine Spiegelebene  $\sigma_h$  besitzt [13]. Als Gruppenelemente treten auf:

- $n$  Drehungen  $C_n^\mu$ ,  $\mu \in [1, n]$ ,
- $n$  Drehungen  $C_2^{(\mu)} = C_2' C_n^\mu$ ,  $\mu \in [1, n]$ ,
- $n$  Spiegelungen  $\sigma_v^{(\mu)} = \sigma_h C_2' C_n^\mu$ ,  $\mu \in [1, n]$ ,
- $n$  Drehspiegelungen  $S_n^{(\mu)} = \sigma_h C_n^\mu$ ,  $\mu \in [1, n]$ .

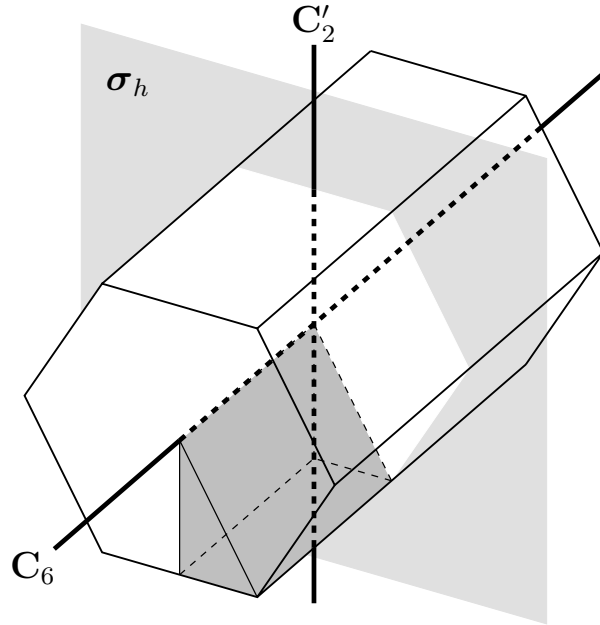


Abbildung B.4: Regelmäßiges 6-eckiges Prisma als Beispiel eines geometrischen Objektes mit  $D_{6h}$ -Symmetrie. Eingezeichnet sind die Symmetrieelemente eines minimalen Erzeugendensystems: die Hauptdrehachse  $\mathbf{C}_6$ , die Drehachse  $\mathbf{C}_2'$  sowie die horizontale Spiegelebene  $\sigma_h$ . Ein mögliches Fundamentalgebiet dieses Körpers ist dunkelgrau hervorgehoben.

Damit ist die Gruppe  $D_{nh}$  von der Ordnung

$$|D_{nh}| = 4n. \quad (\text{B.4.1})$$

Ein minimales Erzeugendensystem dieser Gruppe setzt sich beispielsweise aus der Drehung  $C_n$  um den Winkel  $\frac{2\pi}{n}$ , der Drehung  $C_2'$  sowie der Spiegelung  $\sigma_h$  zusammen:

$$D_{nh} = \langle C_n, C_2', \sigma_h \rangle. \quad (\text{B.4.2})$$

Durch Angabe der definierenden Relationen

$$C_n^n = E, \quad C_n C_2' = C_2' C_n^{-1},$$

$$\begin{aligned} C_2'^2 &= E, & C_n \sigma_h &= \sigma_h C_n, \\ \sigma_h^2 &= E, & \sigma_h C_2' &= C_2' \sigma_h \end{aligned}$$

ist der Aufbau der  $D_{nh}$ -Gruppe vollständig beschrieben.

Die Drehungen  $C_n^\nu$  sowie die Spiegelungen  $\sigma_v^{(\mu)}$  bilden dieselben Klassen wie die  $C_{nv}$ -Gruppe. Da sich die Drehspiegelungen  $S_n^{(\mu)}$  analog zu den Drehungen verhalten, formen demzufolge diese Elemente Klassen in der gleicher Weise. Ähnlich zu den Spiegelungen bilden die Drehungen  $C_2^{(\mu)}$  für gerades  $n$  zwei und für ungerades  $n$  eine Klasse. Es ist leicht erkennbar, dass die  $D_{nh}$ -Gruppe doppelt soviel Klassen wie die  $C_{nv}$ -Gruppe besitzt:

$$N_{\text{kl}} = \begin{cases} n + 6; & n \text{ gerade} \\ n + 3; & n \text{ ungerade} \end{cases}. \quad (\text{B.4.3})$$

Tabelle B.4 enthält den vollständigen Satz der inäquivalenten, irreduziblen Darstellungen [20, 19], die ebenfalls mittels Gleichung (B.3.4) in reelle Form transformiert werden können.

$n = 2$	$n$ gerade	$n$ ungerade	$C_n^\mu$	$\sigma_v^{(\mu)}$	$S_n^{(\mu)}$	$C_2^{(\mu)}$
$A_g$	$A_{1g}$	$A'_1$	1	1	1	1
$A_u$	$A_{1u}$	$A''_1$	1	-1	-1	1
$B_{1g}$	$A_{2g}$	$A'_2$	1	-1	1	-1
$B_{1u}$	$A_{2u}$	$A''_2$	1	1	-1	-1
$B_{3u}$	$B_{1g}/B_{1u}$		$(-1)^\mu$	$(-1)^\mu$	$(-1)^\mu$	$(-1)^\mu$
$B_{3g}$			$(-1)^\mu$	$-(-1)^\mu$	$-(-1)^\mu$	$(-1)^\mu$
$B_{2u}$	$B_{2g}/B_{2u}$		$(-1)^\mu$	$-(-1)^\mu$	$(-1)^\mu$	$-(-1)^\mu$
$B_{2g}$			$(-1)^\mu$	$(-1)^\mu$	$-(-1)^\mu$	$-(-1)^\mu$
	$E_{mg}/E_{mu}$	$E'_m$	$\mathbf{M}_m^\mu$	$\mathbf{PM}_m^\mu$	$\mathbf{M}_m^\mu$	$\mathbf{PM}_m^\mu$
		$E''_m$	$\mathbf{M}_m^\mu$	$\mathbf{PM}_m^\mu$	$-\mathbf{M}_m^\mu$	$-\mathbf{PM}_m^\mu$
	$m \in [1, \frac{n}{2} - 1]$	$m \in [1, \frac{n-1}{2}]$	$\mu \in [1, n]$			
$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{M}_m = \begin{pmatrix} \exp(j\alpha m) & 0 \\ 0 & \exp(-j\alpha m) \end{pmatrix}, \alpha = \frac{2\pi}{n}$						

Tabelle B.4: Vollständiger Satz inäquivalenter, irreduzibler Darstellungen der Punktsymmetriegruppe  $D_{nh}$ . Für ungerades  $n$  besitzt diese Gruppe 4, andernfalls 8 eindimensionale irreduzible Darstellungen. Alle restlichen Darstellungen sind für  $n > 2$  zweidimensional.

## B.5 Die Gruppe $O$

Die Oktaedergruppe  $O$ , die zum Beispiel die volle Symmetrie des in Abbildung B.5 gezeigten geometrischen Gebildes beschreibt, besitzt folgende Symmetrieelemente:

- Identität  $E$ ,
- 9 Drehungen  $C_4^{(\mu)}, C_4^{(\mu)^2}, C_4^{(\mu)^3}$ ,  $\mu \in [1, 3]$ ,
- 8 Drehungen  $C_3^{(\nu)}, C_3^{(\nu)^2}$ ,  $\nu \in [1, 4]$ ,
- 6 Drehungen  $C_2^{(\lambda)}$ ,  $\lambda \in [1, 6]$ .

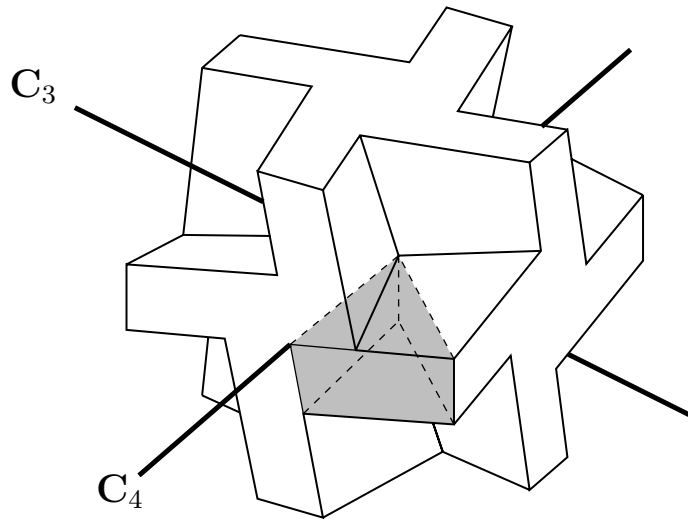


Abbildung B.5: Geometrisches Objekt, das die Symmetrie der Oktaedergruppe besitzt. Zusätzlich dargestellt sind die Symmetrieelemente des gewählten minimalen Erzeugendensystems: die Drehachse  $C_4$  und die Drehachse  $C_3$ . Des Weiteren ist ein mögliches Fundamentalgebiet dieses Körpers dunkelgrau hervorgehoben.

Damit ergibt sich die Gruppenordnung zu

$$|O| = 24. \quad (\text{B.5.1})$$

Als erzeugende Elemente können beispielsweise die Drehung um den Winkel  $\frac{\pi}{2}$  sowie die Drehung um den Winkel  $\frac{2}{3}\pi$  mit den in Abbildung B.5 eingezeichneten Drehachsen entsprechender Zähligkeit gewählt werden:

$$O = \langle C_4, C_3 \rangle. \quad (\text{B.5.2})$$

Mit den Relationen

$$C_4^4 = E, \quad C_3 C_4 = C_4^{-1} C_3^{-1}, \quad C_3^3 = E$$

ist schließlich die Definition dieser Gruppe abgeschlossen. Die Anzahl der konjugierten Klassen und damit die Anzahl irreduzibler Darstellungen beträgt

$$N_{\text{kl}} = 5. \quad (\text{B.5.3})$$

In Tabelle B.5 ist der vollständige Satz der inäquivalenten, irreduziblen Darstellungen dieser Gruppe zusammengestellt [99].

## B.6 Die Gruppe $O_h$

Die volle Oktaedergruppe  $O_h$ , die auch die höchste Symmetrie eines Würfels oder Oktaeders charakterisiert, lässt sich als direktes Produkt aus der Oktaedergruppe  $O$  und der Inversionsgruppe  $C_i$  schreiben [13]. Als Symmetrieeoperationen treten auf:

- Identität  $E$ ,
- 9 Drehungen  $C_4^{(\mu)}, C_4^{(\mu)^2}, C_4^{(\mu)^3}$ ,  $\mu \in [1, 3]$ ,
- 8 Drehungen  $C_3^{(\nu)}, C_3^{(\nu)^2}$ ,  $\nu \in [1, 4]$ ,
- 6 Drehungen  $C_2^{(\lambda)}$ ,  $\lambda \in [1, 6]$ ,
- Inversion  $i$ ,
- 9 Drehspiegelungen  $S_4^{(\mu)}, S_4^{(\mu)^2} = \sigma_h^{(\mu)}, S_4^{(\mu)^3}$ ,  $\mu \in [1, 3]$ ,
- 8 Drehspiegelungen  $S_6^{(\nu)}, S_6^{(\nu)^5}$ ,  $\nu \in [1, 4]$ ,
- 6 Spiegelungen  $\sigma_d^{(\lambda)}$ ,  $\lambda \in [1, 6]$ .

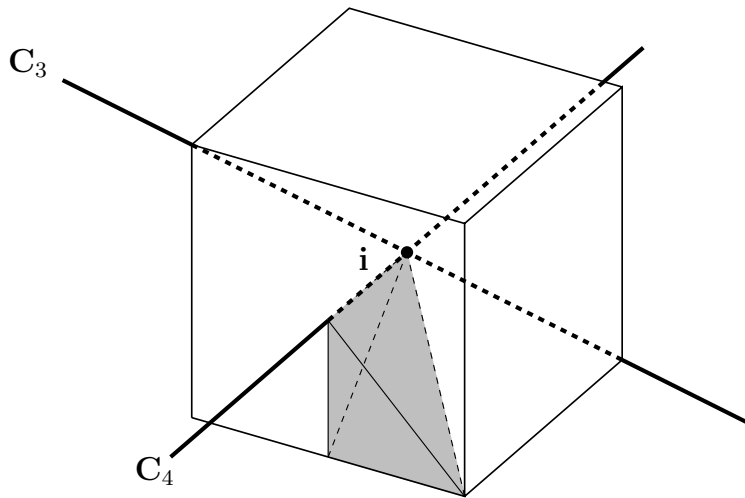


Abbildung B.6: Würfel als Vertreter geometrischer Objekte mit  $O_h$ -Symmetrie. Eingezeichnet sind die Symmetrieelemente des gewählten minimalen Erzeugendensystems: die Drehachse  $C_4$ , die Drehachse  $C_3$  sowie das Inversionszentrum  $i$ . Des Weiteren ist ein mögliches Fundamentalgebiet dieses Körpers dunkelgrau hervorgehoben.

Damit ergibt sich die Gruppenordnung zu

$$|O_h| = 48. \quad (\text{B.6.1})$$

Als erzeugende Elemente können beispielsweise, wie in Abbildung B.6 illustriert, die Drehung um den Winkel  $\frac{\pi}{2}$  mit der Drehachse, die durch die Mittelpunkte einander gegenüberliegender Seitenflächen verläuft, die Drehung um den Winkel  $\frac{2}{3}\pi$  mit der Drehachse durch zwei gegenüberliegende Eckpunkte sowie die Inversion im geometrischen Schwerpunkt des Würfels gewählt werden:

$$O_h = \langle C_4, C_3, i \rangle. \quad (\text{B.6.2})$$



Mit den Beziehungen

$$\begin{aligned} C_4^4 &= E, & C_3 C_4 &= C_4^{-1} C_3^{-1}, \\ C_3^3 &= E, & C_3 i &= i C_3, \\ i^2 &= E, & C_4 i &= i C_4 \end{aligned}$$

ist schließlich die Definition der vollen Oktaedergruppe abgeschlossen. Die Anzahl der konjugierten Klassen und damit die Anzahl der irreduziblen Darstellungen beträgt

$$N_{\text{kl}} = 10. \quad (\text{B.6.3})$$

In Tabelle B.5 ist der vollständige Satz der inäquivalenten, irreduziblen Darstellungen der  $O_h$ -Gruppe zusammengestellt [99].

$O$	$O_h$	$C_4 (= a)$	$C_3 (= b)$	$i (= c)$
$A_1$	$A_{1g}/A_{1u}$	1	1	$\pm 1$
$A_2$	$A_{2g}/A_{2u}$	-1	1	$\pm 1$
$E$	$E_g/E_u$	$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}$	$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}$	$\pm \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
$T_1$	$T_{1g}/T_{1u}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\pm \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
$T_2$	$T_{2g}/T_{2u}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\pm \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
$E = 1,$ $C_4^{(1)} = a,$ $C_4^{(1)^2} = a^2,$ $C_4^{(1)^3} = a^3,$ $C_4^{(2)} = ba^3$ $C_4^{(2)^2} = b^2a^2b,$ $C_4^{(2)^3} = b^2a^3b,$ $C_4^{(3)} = b^2a,$ $C_4^{(3)^2} = ba^2b^2,$ $C_4^{(3)^3} = a^3b$ $C_3^{(1)} = b,$ $C_3^{(1)^2} = b^2,$ $C_3^{(2)} = a^2b,$ $C_3^{(2)^2} = aba^3,$ $C_3^{(3)} = ba^2b$ $C_3^{(3)^2} = ab^2a,$ $C_3^{(4)} = a^2b^2,$ $C_3^{(4)^2} = ba^2,$ $C_2^{(1)} = ab,$ $C_2^{(2)} = a^2ba^3$ $C_2^{(3)} = a^2b^2a,$ $C_2^{(4)} = ba,$ $C_2^{(5)} = ab^2a^2b,$ $C_2^{(6)} = ba^3b$  (nur $O_h$ -Gruppe) $i = c,$ $S_4^{(1)} = ca,$ $\sigma_h^{(1)} = ca^2,$ $S_4^{(1)^3} = ca^3,$ $S_4^{(2)} = cba^3$ $\sigma_h^{(2)} = cb^2a^2b,$ $S_4^{(2)^3} = cb^2a^3b,$ $S_4^{(3)} = cb^2a,$ $\sigma_h^{(3)} = cba^2b^2,$ $S_4^{(3)^3} = ca^3b$ $S_6^{(1)} = cb,$ $S_6^{(1)^5} = cb^2,$ $S_6^{(2)} = ca^2b,$ $S_6^{(2)^5} = caba^3,$ $S_6^{(3)} = cba^2b$ $S_6^{(3)^5} = cab^2a,$ $S_6^{(4)} = ca^2b^2,$ $S_6^{(4)^5} = cba^2,$ $\sigma_d^{(1)} = cab,$ $\sigma_d^{(2)} = ca^2ba^3$ $\sigma_d^{(3)} = ca^2b^2a,$ $\sigma_d^{(4)} = cba,$ $\sigma_d^{(5)} = cab^2a^2b,$ $\sigma_d^{(6)} = cba^3b$				

Tabelle B.5: Vollständiger Satz inäquivalenter, irreduzibler Darstellungen der erzeugenden Elemente der beiden Oktaedergruppen  $O$  und  $O_h$ . Die Darstellungsmatrizen der übrigen Gruppenelementen lassen sich aus denen der erzeugenden Elemente in der angegebenen Weise ableiten. Für die Oktaedergruppe  $O$  sind dabei die aus der Komposition mit der Inversion  $i$  resultierenden Gruppenelemente auszuschließen.

# Anhang C

## Oberflächenoperatoren

### C.1 Vektoranalytische Operatoren

Durch den Übergang zu Oberflächenintegralgleichungen reduziert sich die Aufgabenstellung auf die Bestimmung tangentialer Vektorfelder, die auf flächenhaften Gebieten im euklidischen Raum erklärt sind. Für Äquivalenzumformungen und Vereinfachungen ist es hilfreich, sinnvolle Definitionen für Differentialoperatoren und Integralsätze auf Oberflächen einzuführen sowie die Zusammenhänge mit ihren dreidimensionalen Gegenstücken aufzuzeigen.

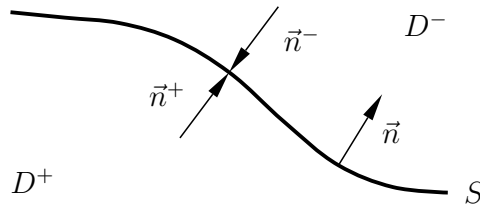


Abbildung C.1: Bezeichnung der in der Definitionsgleichung des Spurooperators auftretenden Gebiete und Orientierungen.

Es sei  $f$  ein Skalar- oder Vektorfeld, das auf einem von einer hinreichend glatten Fläche  $S = \partial D$  mit dem nach außen gerichteten Normaleneinheitsvektor  $\vec{n}$  berandeten dreidimensionalen Gebiet  $D$  erklärt ist. Der Spuroperator  $\tau$  ordnet diesem Feld seinen Grenzwert bei Annäherung des Aufpunktes aus dem Inneren des Gebietes an die Oberfläche in Richtung des Normaleneinheitsvektors

$$(\tau_n f)(\vec{r}) := \lim_{D \ni \vec{r}' \rightarrow \vec{r} \in S} f(\vec{r}') = \lim_{h \rightarrow 0} f[\vec{r} - h\vec{n}(\vec{r})], \quad \vec{r} \in S \quad (\text{C.1.1})$$

zu. Darauf aufbauend kann allgemein der links- bzw. rechtsseitige Grenzwert auf einer in dem Gebiet  $D$  eingebetteten orientierbaren Fläche  $S$ , deren Normaleneinheitsvektor  $\vec{n} = \vec{n}^+$  vom Teilgebiet  $D^+$  und damit der dazu negative Vektor  $-\vec{n} = \vec{n}^-$  vom Teilgebiet  $D^-$  weg zeigt, definiert werden:

$$(\tau_n^\pm f)(\vec{r}) := \lim_{D^\pm \ni \vec{r}' \rightarrow \vec{r} \in S} f(\vec{r}') = \lim_{h \rightarrow 0} f[\vec{r} - h\vec{n}^\pm(\vec{r})], \quad \vec{r} \in S. \quad (\text{C.1.2})$$

Mit dieser in Abbildung C.1 illustrierten Konvention gibt das Vorzeichen die Richtung des Grenzübergangs bezogen auf die Orientierung der Fläche an. Ist die betrachtete Funktion stetig, stimmen diese Grenzwerte mit den Funktionswerten auf der Fläche überein:  $(\tau_n^\pm f)(\vec{r}) = f(\vec{r})$ ,  $\vec{r} \in S$ . Diese Definitionen können für Gebiete mit beliebiger Dimension verallgemeinert werden. So wird der Grenzwert auf der Randkurve  $C = \partial S$  mit nach außen gerichtetem Normaleneinheitsvektor  $\vec{u} = \vec{t} \times \vec{n}$  einer offenen Fläche  $S$  im Raum entsprechend durch

$$(\tau_u f)(\vec{r}) := \lim_{S \ni \vec{r}' \rightarrow \vec{r} \in C} f(\vec{r}') = \lim_{h \rightarrow 0} f(\vec{r} - h\vec{u}), \quad \vec{r} \in C \quad (\text{C.1.3})$$

erklärt.

Durch das Skalarprodukt eines Vektorfeldes  $\vec{F}$  mit dem Normaleneinheitsvektorfeld  $\vec{n}$

$$F_n(\vec{r}) = (\vec{n} \cdot \vec{F})(\vec{r}) := \vec{n}(\vec{r}) \cdot \vec{F}(\vec{r}), \quad \vec{r} \in S \quad (\text{C.1.4})$$

wird ein Randoperator, der die Normalkomponente eines Vektorfeldes bezüglich der Fläche selektiert, erklärt. In gleicher Weise wird durch das Kreuzprodukt mit dem Normaleneinheitsvektorfeld

$$\vec{F}_t(\vec{r}) = (\vec{n} \times \vec{F})(\vec{r}) := \vec{n}(\vec{r}) \times \vec{F}(\vec{r}), \quad \vec{r} \in S \quad (\text{C.1.5})$$

ein Randoperator definiert, der die Tangentialkomponenten mit der Eigenschaft  $\vec{F}_t \cdot \vec{n} = 0$  extrahiert. Damit ist eine Zerlegung des auf die Oberfläche beschränkten Vektorfeldes der Form

$$(\tau_n \vec{F})(\vec{r}) = (\vec{n} F_n)(\vec{r}) + (\vec{F}_t \times \vec{n})(\vec{r}), \quad \vec{r} \in S \quad (\text{C.1.6})$$

möglich. Weiterhin sei der Randoperator

$$F_u(\vec{r}) = (\vec{u} \cdot \vec{F})(\vec{r}) := \vec{u}(\vec{r}) \cdot \vec{F}(\vec{r}), \quad \vec{r} \in C \quad (\text{C.1.7})$$

definiert.

Zur Ableitung der Oberflächendifferentialoperatoren soll angenommen werden, dass auf der betrachteten Oberfläche  $S$ , deren Orientierung durch den Normaleneinheitsvektor  $\vec{n}$  festgelegt ist, ein krummliniges, orthogonales Koordinatensystem  $(u, v)$  mit den Metrikkoeffizienten  $h_u, h_v$  und den Einheitsvektoren  $\vec{e}_u, \vec{e}_v$  existiert. Für ein auf dieser Oberfläche erklärtes Skalarfeld  $\Phi(u, v)$  soll der Oberflächengradient bei konstanter Fortsetzung der Funktion in Richtung der Flächennormale mit dem räumlichen Gradienten übereinstimmen:

$$\text{Grad } \Phi := \vec{e}_u \frac{1}{h_u} \partial_u \Phi + \vec{e}_v \frac{1}{h_v} \partial_v \Phi. \quad (\text{C.1.8})$$

Analog dazu sollen unter der Oberflächendivergenz eines auf dieser Fläche erklärten Tangentialfeldes  $\vec{F}_t(u, v)$  mit  $\vec{n} \cdot \vec{F}_t = 0$  die räumlichen Quellen bei stetiger Fortsetzung in Normalenrichtung mit dem normierten Metrikkoeffizient  $h_n = 1$

$$\text{Div } \vec{F}_t := \frac{1}{h_u h_v} \left[ \partial_u (h_v \vec{e}_u \cdot \vec{F}_t) + \partial_v (h_u \vec{e}_v \cdot \vec{F}_t) \right]. \quad (\text{C.1.9})$$

verstanden werden. Aus der Festlegung der Oberflächenwirbel in gleicher Weise

$$\text{Rot } \vec{F}_t := \vec{n} \frac{1}{h_u h_v} \left[ \partial_u (h_v \vec{e}_v \cdot \vec{F}_t) - \partial_v (h_u \vec{e}_u \cdot \vec{F}_t) \right] \quad (\text{C.1.10})$$

ist wegen der engen Verwandtschaft mit der Oberflächendivergenz

$$\vec{n} \cdot \text{Rot } \vec{F}_t = \text{Div}(\vec{F}_t \times \vec{n}) \quad \Leftrightarrow \quad \vec{n} \cdot \text{Rot}(\vec{n} \times \vec{F}_t) = \text{Div } \vec{F}_t \quad (\text{C.1.11})$$

sofort die Redundanz eines der beiden Operatoren ersichtlich. Für auf Oberflächen definierte Skalar- und Vektorfelder existieren demzufolge nur zwei Differentialoperatoren, die formal mit den räumlichen Gegenstücken über die Relationen

$$\vec{n} \times \text{Grad}(\tau_n \Phi) = \vec{n} \times \tau_n \text{grad } \Phi, \quad (\text{C.1.12a})$$

$$\text{Div}(\vec{n} \times \tau_n \vec{F}) = -\vec{n} \cdot (\tau_n \text{rot } \vec{F}) \quad (\text{C.1.12b})$$

verknüpft sind. Oberflächenwirbel lassen sich zwar auch erklären, stimmen aber im Wesentlichen mit den Oberflächenquellen überein, weshalb sich auf einen der beiden Operatoren beschränkt werden kann.

Die in dieser Arbeit verwendeten Rechenregeln und Integralsätze für flächenhafte Gebiete lassen sich einfach aus der Vektoranalysis des dreidimensionalen euklidischen Raums übertragen und sollen hier kurz vorgestellt werden. Ausgehend vom STOKESSchen<sup>1</sup> Integralsatz

$$\int_S \vec{n} \cdot \text{rot } \vec{F} dA = \int_{\partial S} \vec{t} \cdot \vec{F} dl, \quad (\text{C.1.13})$$

wobei die Beschränkung auf das Integrationsgebiet implizit gegeben ist, resultiert unter Verwendung der Beziehung (C.1.12b) und nach Substitution von  $\vec{F}_t = \vec{n} \times \vec{F}$  der GAUSSsche Satz für Oberflächen

$$\int_S \text{Div } \vec{F}_t dA = \int_{\partial S} \vec{u} \cdot \vec{F}_t dl, \quad \text{mit: } \vec{u} = \vec{t} \times \vec{n}. \quad (\text{C.1.14})$$

Eine weitere wichtige vektoranalytische Identität lässt sich leicht mit Hilfe der Produktregel ableiten:

$$\text{Div}(\Phi \vec{F}_t) = \Phi \text{Div } \vec{F}_t + \vec{F}_t \cdot \text{Grad } \Phi. \quad (\text{C.1.15})$$

## C.2 Symmetriepoperatoren

Wichtig für die folgenden Betrachtungen ist das Verhalten des Punkt- und Kreuzproduktes von zwei Vektorfeldern unter Symmetrietransformationen

$$T(g)(\vec{F} \cdot \vec{G}) = [\vec{T}(g)\vec{F}] \cdot [\vec{T}(g)\vec{G}], \quad (\text{C.2.1a})$$

$$\vec{T}(g)(\vec{F} \times \vec{G}) = \text{sgn}(g)[\vec{T}(g)\vec{F}] \times [\vec{T}(g)\vec{G}] = [\vec{\tilde{T}}(g)\vec{F}] \times [\vec{T}(g)\vec{G}], \quad (\text{C.2.1b})$$

das sich unter anderem aus einer konkreten Matrixdarstellung ableiten lässt.

Häufig handelt es sich bei den betrachteten symmetrischen Rechengebieten in der Randelementmethode um im Ortsraum eingebettete orientierbare Flächen. In diesem Zusammenhang ist eine sinnvolle Festlegung des Transformationsverhaltens der die Orientierung

<sup>1</sup>George Gabriel Stokes, 1819–1903, irischer Mathematiker und Physiker

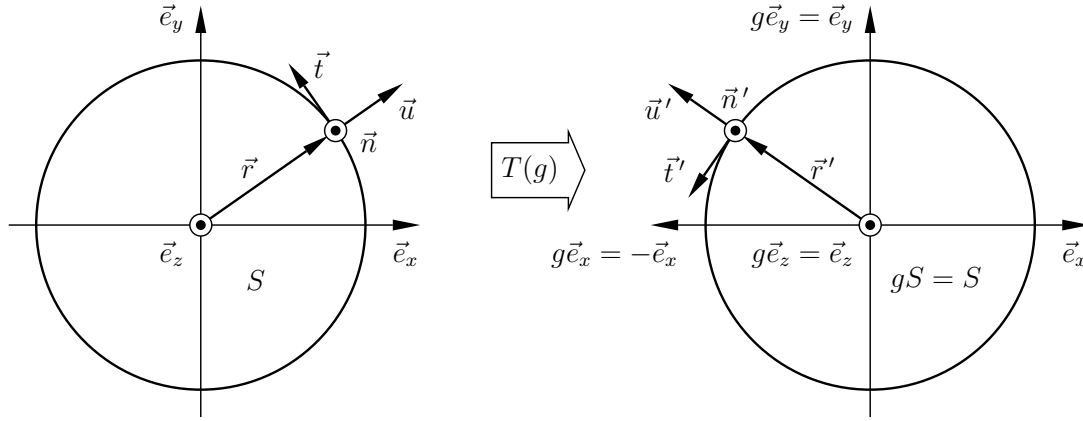


Abbildung C.2: Grafische Veranschaulichung des Transformationsverhaltens der räumlichen Orientierung zweidimensionaler symmetrischer Gebiete mit Berandung unter uneigentlichen Bewegungen am Beispiel der Spiegelung einer Kreisfläche. Mit der Festlegung, dass sich der Normaleneinheitsvektor  $\vec{n}$  wie ein Vektorfeld transformiert, muss sich der Tangenteneinheitsvektor  $\vec{t}$  der Randkurve zur Wahrung der Orientierung wie ein Pseudovektorfeld verhalten.

beschreibenden Vektorfelder von Interesse, die ähnlich zur Definition der Symmetrietransformationen von elektromagnetischen Feldgrößen im Hinblick auf die geforderte Invarianz der mathematischen Modellgleichungen erfolgen sollte. Damit der GAUSSsche Integralsatz

$$\int_D \operatorname{div} \vec{F} dV = \int_{\partial D} \vec{n} \cdot \vec{F} dA \quad (\text{C.2.2})$$

nach einer Koordinatentransformation unter der Annahme der  $G$ -Invarianz des Integrationsgebietes seine Form beibehält, muss die Totalsymmetrie des Normaleneinheitsvektorfeldes bezüglich der Isometrien der Gruppe  $G$

$$\vec{T}(g)\vec{n} = \vec{n}, \quad \forall g \in G \quad (\text{C.2.3})$$

gefordert werden. Dies ist wegen der  $G$ -Invarianz der Hüllfläche für eigentliche Bewegungen des Ortsraums auch a priori erfüllt. Damit die Orientierung jedoch auch bei Raum-inversion erhalten bleibt, muss sich der Normaleneinheitsvektor wie ein Vektorfeld transformieren. Mit dieser Festlegung ist gleichermaßen der Erhalt des Orientierungssinnes der Hüllfläche zusammenhängender Gebiete gewährleistet. Zur Sicherstellung der Forminvarianz des STOKESSchen Integralsatzes (C.1.13) muss neben des Normaleneinheitsvektorfeldes der als  $G$ -invariant vorausgesetzten Fläche auch das Tangenteneinheitsvektorfeld ihrer Randkurve totalsymmetrisch sein

$$\tilde{\vec{T}}(g)\vec{t} = \vec{t}, \quad \forall g \in G. \quad (\text{C.2.4})$$

Wegen der Umkehrung des Orientierungssinnes bei uneigentlichen Symmetrietransformationen muss der Tangenteneinheitsvektor folglich die Transformationseigenschaften eines Pseudovektorfeldes aufweisen. In Abbildung C.2 sind die bisherigen Überlegungen grafisch veranschaulicht. Aus Gleichung (C.2.1b) folgt unmittelbar, dass sich der Normaleneinheitsvektor bezüglich der Randkurve  $\vec{u}$  wie ein Vektorfeld transformiert, womit implizit

die Bedingung

$$\vec{T}(g)\vec{u} = \vec{u}, \quad \forall g \in G \quad (\text{C.2.5})$$

erfüllt ist.

Unter der Annahme, dass das Gebiet  $D$  und daraus abgeleitet auch die Berandung  $S = \partial D$  invariant unter einer Gruppe  $G$  von Symmetrietransformationen sind, folgt mit  $gD = D$  und  $gS = S$  und unter Verwendung der leicht ableitbaren Identität

$$T(g) \lim_{D \ni \vec{r}' \rightarrow \vec{r} \in S} \Phi(\vec{r}') = \lim_{gD \ni \vec{r}' \rightarrow \vec{r} \in gS} [T(g)\Phi](\vec{r}') \quad (\text{C.2.6})$$

mit der Kurzform

$$T(g)\tau_n = \tau_{gn}T(g) \quad (\text{C.2.7})$$

sofort die Vertauschbarkeit des Spuoperators in Gleichung (C.1.1) mit dieser Gruppe. Entsprechende Aussagen gelten ebenfalls für den in Gleichung (C.1.3) definierten Spuroperator, wenn die offene Fläche und folglich auch deren Berandung symmetrisch sind. Die betrachteten Vektorfelder bilden in Verbindung mit dem Punkt- und Kreuzprodukt die bereits eingeführten Randoperatoren, die bei Vorliegen symmetrischer Gebiete mit der zugrunde liegenden Gruppe der Symmetrieoperatoren kommutieren:

$$T(g)(\vec{n} \cdot \vec{F}) = \vec{n} \cdot [\vec{T}(g)\vec{F}], \quad (\text{C.2.8a})$$

$$\vec{T}(g)(\vec{n} \times \vec{F}) = \vec{n} \times [\text{sgn}(g)\vec{T}(g)\vec{F}] = \vec{n} \times [\tilde{\vec{T}}(g)\vec{F}], \quad (\text{C.2.8b})$$

$$T(g)(\vec{u} \cdot \vec{F}) = \vec{u} \cdot [\vec{T}(g)\vec{F}], \quad (\text{C.2.8c})$$

$$T(g)(\vec{t} \cdot \vec{F}) = \vec{t} \cdot [\text{sgn}(g)\vec{T}(g)\vec{F}] = \vec{t} \cdot [\tilde{\vec{T}}(g)\vec{F}]. \quad (\text{C.2.8d})$$

Eine weitere wichtige Konsequenz ist die Kommutativität mit den auf Oberflächen erklärten Differentialoperatoren:

$$\vec{T}(g) \text{Grad} = \text{Grad} T(g), \quad (\text{C.2.9a})$$

$$T(g) \text{Div} = \text{Div} \vec{T}(g). \quad (\text{C.2.9b})$$





# Anhang D

## Isometrien im Ortsraum

### Drehung

Eine diskrete Drehung des Ortsraums um eine durch den Ursprung des gewählten Koordinatensystems verlaufende Drehachse ist mittels der reellen  $3 \times 3$ -Matrix  $\mathbf{D}(C_n)$  mit den Elementen

$$[\mathbf{D}(C_n)]_{ij} = v_i v_j + \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right) (\delta_{ij} - v_i v_j) - \sin\left(\frac{2\pi}{n}\right) \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} v_k, \quad \text{mit: } \|\mathbf{v}\| = 1 \quad (\text{D.0.1})$$

realisierbar. Hierin repräsentieren  $v_i$  die Komponenten des die Drehachse beschreibenden Einheitsvektors  $\mathbf{v}$ . Drehmatrizen sind orthogonal, ihre Determinanten weisen wegen der abstandserhaltenden Transformationseigenschaft den Wert Eins auf.

### Spiegelung

Die Spiegelung an einer durch den Ursprung des gewählten Koordinatensystems verlaufenden Ebene im dreidimensionalen euklidischen Raum wird durch die HOUSEHOLDER<sup>1</sup>-Matrix  $\mathbf{D}(\sigma)$  mit den Elementen

$$[\mathbf{D}(\sigma)]_{ij} = 1 - 2v_i v_j, \quad \text{mit: } \|\mathbf{v}\| = 1 \quad (\text{D.0.2})$$

ausgedrückt. Hierin bezeichnen  $v_i$  die Komponenten des Normaleneinheitsvektors der Spiegelebene. Spiegelungsmatrizen sind orthogonal und symmetrisch, ihre Determinanten besitzen den Wert  $-1$ .

### Inversion

Eine Inversion resultiert beispielsweise aus drei hintereinander ausgeführten Spiegelungen an paarweise senkrecht zueinander stehenden Ebenen:

$$\mathbf{D}(i) = -\mathbf{I}. \quad (\text{D.0.3})$$

Alle anderen Symmetrietransformationen lassen sich aus diesen elementaren Operationen zusammensetzen. Die Wahl des Koordinatensystems kann prinzipiell beliebig erfolgen. Bei Punktgruppen, die auch in dieser Arbeit ausschließlich betrachtet werden, wird üblicherweise der Fixpunkt der zugrunde liegenden Symmetriegruppe als Koordinatenursprung und die  $z$ -Achse als Hauptdrehachse festgelegt.

---

<sup>1</sup>Alston Scott Householder, 1904–1993, US-amerikanischer Mathematiker



# Symbolverzeichnis

## Allgemein

$\mathbb{N}$	Menge der natürlichen Zahlen
$\mathbb{R}$	Menge der reellen Zahlen
$\mathbb{C}$	Menge der komplexen Zahlen
$\mathbb{I}$	Indexmenge, $\mathbb{I} \subset \mathbb{N}$
$j$	imaginäre Einheit, $j^2 = -1$
$\mathbf{x}$	Spaltenvektor
$\mathbf{X}$	Matrix
$[\mathbf{x}]_i$	$i$ -te Komponente des Vektors $\mathbf{x}$
$[\mathbf{X}]_{ij}$	Komponente der $i$ -ten Zeile und $j$ -ten Spalte der Matrix $\mathbf{X}$
$\mathbf{X}^T$	transponierte Matrix
$\mathbf{X}^H$	adjungierte Matrix
$\mathbf{X}^{-1}$	Inverse der Matrix $\mathbf{X}$
$\mathbf{X}^\dagger$	MOORE-PENROSE-Pseudoinverse
$x$	skalare Größe (Tensor 0. Stufe), Skalarfeld
$\vec{x}$	vektorielle Größe (Tensor 1. Stufe), Vektorfeld
$\bar{\bar{x}}$	Dyade (Tensor 2. Stufe)
$\underline{x}$	komplexe Größe
$\underline{x}^\star$	konjugiert komplexe Größe
$\hat{x}$	Amplitude einer zeitharmonischen Größe
$\tilde{x}$	Approximierte, Näherungswert
$\mathcal{O}$	LANDAU <sup>2</sup> -Symbol
$\operatorname{Re}$	Realteil einer komplexen Größe
$ \underline{x} $	Betrag einer komplexen Größe
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Standardskalarprodukt, $\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle := \sum_i x_i y_i^\star$
$\vec{x} \cdot \vec{y}$	Punktprodukt (symmetrische Bilinearform), $\vec{x} \cdot \vec{y} := \sum_i x_i y_i$
$\vec{x} \times \vec{y}$	Kreuzprodukt (schiefsym. Bilinearform), $\vec{x} \times \vec{y} := \sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} \vec{e}_i x_j y_k$
$\ \vec{x}\ $	euklidische Norm (2-Norm) eines Vektors, $\ \vec{x}\  := \sqrt{\langle \vec{x}, \vec{x} \rangle}$
$\max$	Maximum
$\sup$	Supremum
$\lim$	Grenzwert

---

<sup>2</sup>Edmund Georg Hermann Landau, 1877–1938, deutscher Mathematiker

---

$\text{tr}$	Spur einer Matrix
$\det$	Determinante einer Matrix
$\dim$	Dimension eines Vektorraums
$\text{kgV}$	kleinste gemeinsame Vielfache
$\delta_{ij}$	KRONECKER <sup>3</sup> -Delta
$\epsilon_{ijk}$	LEVI-CIVITA <sup>4</sup> -Symbol
$\partial$	partieller Ableitungsoperator, Rand eines Gebiets
$\text{grad}$	Gradient eines Skalarfeldes im Ortsraum
$\text{div}$	Quellen eines Vektorfeldes im Ortsraum
$\text{rot}$	Wirbel eines Vektorfeldes im Ortsraum
$\text{Grad}$	Oberflächengradient eines Skalarfeldes
$\text{Div}$	Oberflächendivergenz eines tangentialen Vektorfeldes
$\text{Rot}$	Oberflächenrotation eines tangentialen Vektorfeldes
$\Delta$	LAPLACE <sup>5</sup> -Operator
$\tau_n, \tau_u$	Spuroperatoren
$\star$	Faltungsprodukt
$\kappa$	Koordinatenabbildung
$(x, y, z)$	kartesische Koordinaten
$\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$	kartesische Einheitsvektoren
$(r, \vartheta, \varphi)$	Kugelkoordinaten
$\vec{e}_r, \vec{e}_\vartheta, \vec{e}_\varphi$	sphärische Einheitsvektoren
$\text{span}$	lineare Hülle
$\ker$	Kern bzw. Nullraum einer linearen Abbildung
$\text{im}$	Bild einer linearen Abbildung
$\sim$	äquivalent
$\cong$	isomorph
$\text{cl}$	Abschluss (abgeschlossenes Gebiet)
$\text{int}$	Inneres (offenes Gebiet)
$[\cdot]$	obere GAUSS-Klammer
$\in$	Element von
$\subseteq$	Teilmenge
$\forall$	Allquantor
$\exists$	Existenzquantor
$\oplus$	direkte Summe
$\wedge$	logisches UND
$\vee$	logisches ODER
$\cap$	Durchschnitt von Mengen
$\cup$	Vereinigung von Mengen
$\setminus$	Differenz von Mengen
$:=$	per definitionem

---

<sup>3</sup>Leopold Kronecker, 1823–1891, deutscher Mathematiker

<sup>4</sup>Tullio Levi-Civita, 1873–1941, italienischer Mathematiker

<sup>5</sup>Pierre-Simon Laplace, 1749–1827, französischer Mathematiker und Astronom

**Klassische Elektrodynamik**

$D_0$	Ortsraum (unbeschränkter Raum)
$C$	Raumkurve / eindimensionales Gebiet
$S$	Fläche im Raum / zweidimensionales Gebiet
$D$	Teilraum / dreidimensionales Gebiet
$\vec{r}$	Ortsvektor, Element des Ortsraumes, $\vec{r} \in D_0$
$\mathbf{r}$	Vektor der Ortskoordinaten, $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$
$dl$	differentielles Wegelement
$dA$	differentielles Flächenelement
$dV$	differentielles Volumenelement
$\vec{n}$	Normaleneinheitsvektor einer Fläche im Raum
$\vec{t}$	Tangenteneinheitsvektor einer Raumkurve
$\vec{u}$	Normaleneinheitsvektor der Randkurve einer offenen Fläche, $\vec{u} = \vec{t} \times \vec{n}$
$t$	Zeit, $t \in \mathbb{R}$
$\omega$	Kreisfrequenz
$\sigma$	Dämpfung
$\tau$	Abklingkonstante, $\tau = \sigma^{-1}$
$\underline{\omega}$	komplexe Kreisfrequenz, $\underline{\omega} = \omega + j\sigma$
$\varepsilon$	Permittivität
$\mu$	Permeabilität
$\kappa$	elektrische Leitfähigkeit
$c$	Lichtgeschwindigkeit, $c = \sqrt{\mu\varepsilon}^{-1}$
$\lambda$	Wellenlänge, $\lambda = 2\pi k^{-1}$
$\underline{k}$	komplexe Wellenzahl, $\underline{k} = \underline{\omega} c^{-1}$
$Z$	Wellenwiderstand, $Z = \sqrt{\mu\varepsilon^{-1}}$
$Y$	Wellenleitwert, $Y = Z^{-1}$
$\varphi$	Phasenwinkel
$\vec{E}, \underline{\vec{E}}$	elektrische Feldstärke und zugehöriger Phasor
$\vec{H}, \underline{\vec{H}}$	magnetische Feldstärke und zugehöriger Phasor
$\vec{D}, \underline{\vec{D}}$	elektrische Verschiebungsflussdichte und zugehöriger Phasor
$\vec{B}, \underline{\vec{B}}$	magnetische Flussdichte und zugehöriger Phasor
$\vec{J}, \underline{\vec{J}}$	elektrische Volumenstromdichte und zugehöriger Phasor
$\varrho, \underline{\varrho}$	elektrische Raumladungsdichte und zugehöriger Phasor
$\vec{P}_{\text{el}}$	Polarisation
$\vec{M}_{\text{mag}}$	Magnetisierung
$\vec{S}, \underline{\vec{S}}$	POYNTINGScher Vektor und zugehöriger Phasor
$\vec{K}, \underline{\vec{K}}$	elektrische Flächenstromdichte und zugehöriger Phasor
$\sigma, \underline{\sigma}$	elektrische Flächenladungsdichte und zugehöriger Phasor
$\vec{M}, \underline{\vec{M}}$	magnetische Flächenstromdichte und zugehöriger Phasor
$\eta, \underline{\eta}$	magnetische Flächenladungsdichte und zugehöriger Phasor
$\vec{A}_e, \underline{\vec{A}_e}$	elektrisches Vektorpotential und zugehöriger Phasor
$\Phi_e, \underline{\Phi_e}$	elektrisches Skalarpotential und zugehöriger Phasor

$\vec{A}_m, \underline{A}_m$	magnetisches Vektorpotential und zugehöriger Phasor
$\Phi_m, \underline{\Phi}_m$	magnetisches Skalarpotential und zugehöriger Phasor
$\vec{v}$	Geschwindigkeitsfeld
$\vec{F}$	Kraftvektor
$\vec{p}$	Polarisationsvektor einer ebenen Welle
$v$	Elliptizität einer ebenen Welle

### Momentenmethode

$X, Y$	Funktionenräume
$x, y$	Elemente der Funktionenräume $X, Y$
$X_N, Y_N$	diskrete Unterräume von $X, Y$
$x_N, y_N$	Elemente der Unterräume $X_N, Y_N$
$N$	Anzahl von Basisfunktionen
$f_n, w_n$	Ansatz- und Testfunktion
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Bilinearform
$P_N, Q_N$	Projektoren auf $X_N, Y_N$
$\mathcal{L}$	linearer Operator
$\mathbf{L}$	Darstellungsmatrix der Approximierten von $\mathcal{L}$
$\mathbf{a}, \mathbf{b}$	Koordinatenvektoren
$\mathbf{G}$	GRAMsche Matrix

### Numerische Integration

$Q$	Quadraturformel
$R$	Restfunktional
$N$	Anzahl von Quadraturpunkten
$p$	Polynomgrad
$I$	Integral (allgemein)
$f$	Integrand
$w$	Gewichtsfunktion

### Fernfeldberechnung

$\mathcal{F}$	Fernfeldoperator
$\underline{H}$	Kernfunktion des Fernfeldintegrals
$\underline{\vec{E}}_\infty, \underline{\vec{H}}_\infty$	Fernfeldcharakteristik
$\sigma$	Rückstreuquerschnitt
$\mathbf{F}$	diskreter Fernfeldoperator
$\mathbf{C}$	diskretes Pendant zum Operator $\vec{e}_r \times$
$\mathbf{e}_\infty, \mathbf{h}_\infty$	Fernfeldvektoren
$\mathbf{m}_q$	TAYLOR-Koeffizienten
$Q$	Ordnung der TAYLOR-Entwicklung
$a_i, b_i$	Koeffizienten der PADÉ-Approximation
$L, M$	Ordnung der rationalen Entwicklung

**Randelementmethode**

$R(\vec{r}, \vec{r}')$	Abstandsfunktion, euklidische Distanz, $R(\vec{r}, \vec{r}') := \ \vec{r} - \vec{r}'\ $
$c(\vec{r})$	ortsabhängiger Vorfaktor
$\delta$	DIRACsche Deltadistribution
$\underline{\bar{g}}_e, \underline{\bar{G}}_e$	elektrische GREENsche Dyade, $\underline{\bar{G}}_e(\vec{r}, \vec{r}') := \underline{\bar{g}}_e(\vec{r} - \vec{r}')$
$\underline{\bar{g}}_m, \underline{\bar{G}}_m$	magnetische GREENsche Dyade, $\underline{\bar{G}}_m(\vec{r}, \vec{r}') := \underline{\bar{g}}_m(\vec{r} - \vec{r}')$
$\underline{g}, \underline{G}$	Fundamentallösung des HELMHOLTZ-Operators, $\underline{G}(\vec{r}, \vec{r}') := \underline{g}(\vec{r} - \vec{r}')$
$\bar{I}$	Einheitsdyade
$\mathcal{I}$	Einheitsoperator
$\mathcal{T}$	Integraloperator mit schwach singulärem Kern
$\mathcal{K}$	Integraloperator mit stark singulärem Kern
$\mathcal{N}$	Integraloperator mit hypersingulärem Kern
$P$	Eckpunkt eines Dreiecks
$E$	Kante eines Dreiecks
$T$	Dreieck
$l$	Länge der Kante $l$
$A$	Flächeninhalt des Dreiecks $T$
$h$	Diskretisierungsparameter, Gitterschrittweite
$N_T$	Anzahl von Dreiecken
$J$	JACOBI-Determinante der Transformation
$z$	Dichtefunktion
$\underline{\mathbf{Z}}$	Impedanzmatrix
$\underline{\mathbf{i}}$	Lösungsvektor
$\underline{\mathbf{u}}$	Anregungsvektor
$\mathbf{0}$	Nullmatrix
$\mathbf{I}$	Einheitsmatrix
$\mathbf{\Pi}$	Projektionsmatrix
$\mathbf{Q}$	Orthonormalbasis des Projektors $\mathbf{\Pi}$

**Gruppenalgebra**

$\mathbb{C}(G)$	Gruppenalgebra über den komplexen Zahlen
$a$	Element der Gruppenalgebra $\mathbb{C}(G)$
$\mathbb{C}(G)^*$	Dualraum der Algebra $\mathbb{C}(G)$
$\alpha$	Element (Funktional) des Dualraums $\mathbb{C}(G)^*$
$\langle \cdot, \cdot \rangle_G$	Skalarprodukt auf der Algebra $\mathbb{C}(G)$
$\star$	Faltungsprodukt auf Gruppen
$\delta$	Einselement der Algebra $\mathbb{C}(G)$
$R_k^{ij}$	Basiselement der Algebra $\mathbb{C}(G)$
$a^*$	formal Adjungierte des Elements $a$

**Gruppen und Darstellungen**

$\{\dots\}$	Menge von Elementen, Gruppe von Elementen
$G$	abstrakte Gruppe, Symmetriegruppe
$g$	Gruppenelement, $g \in G$
$e$	Einselement der Gruppe $G$
$\circ$	Verknüpfung von Gruppenelementen
$\phi$	Darstellung einer Gruppe (Homomorphismus), $\phi : G \rightarrow \phi(G)$
$\phi(g)$	Realisierung von $G$
$\phi(G)$	Gruppe der Realisierungen von $G$ , $\phi(G) = \{\phi(g) : g \in G\}$
$\Sigma$	Gruppenaktion
$\langle A \rangle$	Gruppe aus dem minimalen Erzeugendensystem $A = \{g_1, g_2, \dots\}$
$ G $	Ordnung der finiten Gruppe $G$
$K$	Anzahl von Konjugationsklassen
$d_\phi$	Dimension der Darstellung $\phi$
$\mathbf{R}$	irreduzible Darstellung der Gruppe $G$ , $\mathbf{R} : G \rightarrow \mathbf{R}(G)$
$\mathbf{R}(g)$	irreduzible Darstellungsmatrix (unitär), $\mathbf{R}(g) : \mathbb{C}^{d_{\mathbf{R}}} \rightarrow \mathbb{C}^{d_{\mathbf{R}}}$
$\mathbf{R}(G)$	Gruppe der irreduziblen Darstellungsmatrizen, $\mathbf{R}(G) = \{\mathbf{R}(g) : g \in G\}$
$\mathcal{R}$	vollständiger Satz der inäquivalenten, irreduziblen Darstellungen
$\mathbf{D}$	Darstellung der Gruppe $G$ im euklidischen Raum, $\mathbf{D} : G \rightarrow \mathbf{D}(G)$
$\mathbf{D}(g)$	Darstellungsmatrix im euklidischen Raum, $\mathbf{D}(g) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$
$\mathbf{D}(G)$	Gruppe der Darstellungsmatrizen, $\mathbf{D}(G) = \{\mathbf{D}(g) : g \in G\}$
$\text{sgn}$	Vorzeichenfunktion auf Gruppen, $\text{sgn} : G \rightarrow \{1, -1\}$
$T$	Darstellung der Gruppe $G$ auf Funktionenräumen, $T : G \rightarrow T(G)$
$T(g)$	Symmetrietransformation von Skalarfeldern
$\vec{T}(g)$	Symmetrietransformation von Vektorfeldern
$\tilde{T}(g)$	Symmetrietransformation von Pseudoskalarfeldern
$\tilde{\vec{T}}(g)$	Symmetrietransformation von Pseudovektorfeldern
$T(G)$	Gruppe der linearen Operatoren, $T(G) = \{T(g) : g \in G\}$
$\chi$	Charakter einer Matrixdarstellung, $\chi : G \rightarrow \mathbb{C}$
$m$	Multiplizität einer irreduziblen Darstellung
$p$	Periodizität eines Gruppenelements
$Z_n$	abstrakte zyklische Gruppe der Ordnung $n$
$C$	Drehgruppe
$T$	Tetraedergruppe
$O$	Oktaedergruppe
$I$	Ikosaedergruppe
$C_1$	triviale Gruppe, $C_1 = \{E\}$
$C_i$	Inversionsgruppe, $C_i = \{E, i\}$
$C_s$	Spiegelsymmetriegruppe, $C_s = \{E, \sigma\}$
$O(n)$	Gruppe der orthogonalen $(n \times n)$ -Matrizen



**Abstrakte harmonische Analyse**

$\lambda_k(g)$	zum Eigenraum $\mathcal{V}_k(g)$ des Operators $g$ gehörender Eigenwert
$e_k^{(i)}(g)$	zum Eigenraum $\mathcal{V}_k(g)$ des Operators $g$ gehörender Eigenvektor
$P_k(g)$	Projektionsoperator auf den Eigenraum $\mathcal{V}_k(g)$
$P_{\mathbf{R}}^{(ij)}$	Operator auf skalarwertigen Funktionenräumen
$\vec{P}_{\mathbf{R}}^{(ij)}$	Operator auf vektorwertigen Funktionenräumen
$\tilde{P}_{\mathbf{R}}^{(ij)}$	Operator auf pseudoskalarwertigen Funktionenräumen
$\tilde{\tilde{P}}_{\mathbf{R}}^{(ij)}$	Operator auf pseudovektorwertigen Funktionenräumen
$\mathbf{P}_{\mathbf{R}}$	Operatormatrix mit den Elementen $[\mathbf{P}_{\mathbf{R}}]_{ij} = P_{\mathbf{R}}^{(ij)}$
$P_{\mathbf{R}}$	Charakterprojektor, $P_{\mathbf{R}} = \text{tr} \{ \mathbf{P}_{\mathbf{R}} \}$
$W_0, W_{\mathbf{R},0}$	Restriktionsoperatoren auf ein Fundamentalgebiet
$Z$	Fortsetzungsoperator („zero-continuation“)
$\mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(i)}$	Bild des Orthogonalprojektors $P_{\mathbf{R}}^{(ii)}$ , $\mathcal{V}_{\mathbf{R}}^{(i)} = \text{im}\{P_{\mathbf{R}}^{(ii)}\}$
$\mathcal{V}_{\mathbf{R}}$	invarianter Untervektorraum vom $\mathbf{R}$ -ten Symmetrietyp, $\mathcal{V}_{\mathbf{R}} = \text{im}(P_{\mathbf{R}})$
$\mathcal{E}_{\mathbf{R}}^{(i)}$	irreduzibler Darstellungsraum vom Symmetrietyp $\mathbf{R}$ der Dimension $d_{\mathbf{R}}$
$v_{\mathbf{R}}^{(ij)}$	Symmetriekomponente / Entartungspartner vom $\mathbf{R}$ -ten Symmetrietyp
$v_{\mathbf{R},0}^{(ij)}$	restringierte Symmetriekomponente / Entartungspartner
$\mathbf{v}_{\mathbf{R}}$	Symmetriesätze vom $\mathbf{R}$ -ten Symmetrietyp, $[\mathbf{v}_{\mathbf{R}}]_{ij} = v_{\mathbf{R}}^{(ij)}$
$\mathbf{v}_{\mathbf{R},0}$	auf ein Fundamentalgebiet beschränkte Symmetriesätze, $[\mathbf{v}_{\mathbf{R},0}]_{ij} = v_{\mathbf{R},0}^{(ij)}$
$\Omega$	$n$ -dimensionales Gebiet / Untermannigfaltigkeit
$\Gamma$	Rand eines Gebiets / einer Untermannigfaltigkeit, $\Gamma = \partial\Omega$
$I$	Intervall, $I \subseteq \mathbb{R}$
$\mathcal{L}$	linearer, äquivarianter Operator (allgemein)
$\mathcal{B}$	linearer, äquivarianter Randoperator (allgemein)
$\mathcal{U}, \mathcal{V}, \mathcal{W}$	Darstellungsräume der Gruppe $G$ (Funktionenräume)
$u, v, w$	Elemente der Funktionenräume $\mathcal{U}, \mathcal{V}, \mathcal{W}$
$\mathbf{L}_{\mathbf{R},0}$	diskreter Operator zum Symmetrietyp $\mathbf{R}$
$\mathbf{B}_{\mathbf{R}}$	diskreter Randoperator zum Symmetrietyp $\mathbf{R}$
$C^p$	Raum der $p$ -mal stetig differenzierbaren Funktionen
$\mathbf{U}$	unitäre Transformationsmatrix
$\mathbf{F}$	Darstellungsmatrix der FOURIER-Transformation auf Gruppen

**Aufwandsabschätzung**

$C$	Komplexität eines Algorithmus
$K$	reelle Konstante
$R$	Reduktionsfaktor
$X_{\text{CPU}}$	bezüglich der Rechenzeit zur Matrixerzeugung, $X \in \{C, K, R\}$
$X_{\text{RAM}}$	bezüglich des Speicherbedarfs, $X \in \{C, K, R\}$
$X_{\text{LUD}}$	bezüglich der Rechenzeit zur Lösung des Systems, $X \in \{C, K, R\}$

**Symmetrioperationen und -elemente nach Schönflies**

$C_n, \mathbf{C}_n$	Drehsymmetrioperation, $n$ -zählige Drehsymmetrieachse
$S_n, \mathbf{S}_n$	Drehspiegelsymmetrioperation, Drehspiegelsymmetrieachse
$\sigma_v, \boldsymbol{\sigma}_v$	Spiegelsymmetrioperation, vertikale Spiegelsymmetrieebene
$\sigma_d, \boldsymbol{\sigma}_d$	Spiegelsymmetrioperation, dihedrale Spiegelsymmetrieebene
$\sigma_h, \boldsymbol{\sigma}_h$	Spiegelsymmetrioperation, horizontale Spiegelsymmetrieebene
$i, \mathbf{i}$	Inversion, Inversionszentrum
$E$	Einselement (Identität)

**Spezifikation der Symmetrietypen nach Mulliken**

$A$	eindimensionale Darstellung, symmetrisch bezüglich $C_n$
$B$	eindimensionale Darstellung, antisymmetrisch bezüglich $C_n$
$E$	zweidimensionale Darstellung (zweifache Entartung)
$T$	dreidimensionale Darstellung (dreifache Entartung)
$G$	vierdimensionale Darstellung (vierfache Entartung)
$H$	fünfdimensionale Darstellung (fünffache Entartung)
$X_g$	symmetrisch bezüglich der Inversion, $X \in \{A, B, E, T, G, H\}$
$X_u$	antisymmetrisch bezüglich der Inversion, $X \in \{A, B, E, T, G, H\}$
$X_1$	symmetrisch bezüglich $C_2$ oder $\sigma_v$ , $X \in \{A, B\}$
$X_2$	antisymmetrisch bezüglich $C_2$ oder $\sigma_v$ , $X \in \{A, B\}$
$X'$	symmetrisch bezüglich $\sigma_h$ , $X \in \{A, B, E, T, G, H\}$
$X''$	antisymmetrisch bezüglich $\sigma_h$ , $X \in \{A, B, E, T, G, H\}$

**Abkürzungen / Akronyme**

AWE	<i>Asymptotic Waveform Evaluation</i>
BEM	<i>Boundary Element Method</i> (Randelementmethode)
CAD	<i>Computer Aided Design</i> (Computerunterstützter Entwurf)
CFIE	<i>Combined Field Integral Equation</i> (kombinierte Feldintegralgleichung)
CPU	<i>Central Processing Unit</i> (zentrale Verarbeitungseinheit)
DFT	<i>Discrete Fourier Transform</i> (diskrete FOURIER-Transformation)
EFIE	<i>Electric Field Integral Equation</i> (elektrische Feldintegralgleichung)
FDM	<i>Finite Difference Method</i> (Methode der finiten Differenzen)
FEM	<i>Finite Element Method</i> (Methode der finiten Elemente)
FIT	<i>Finite Integration Technique</i> (Methode der finiten Integration)
FLOP	<i>Floating Point Operation</i> (Fließkommaoperation)
LUD	<i>LU-Decomposition</i> (LU-Zerlegung)
MFIE	<i>Magnetic Field Integral Equation</i> (magnetische Feldintegralgleichung)
RADAR	<i>Radio Detection And Ranging</i>
RAM	<i>Random Access Memory</i> (Speicher mit wahlfreiem Zugriff)
RWG	Rao Wilton Glisson (im Zusammenhang mit Basisfunktionen)
TE	<i>Transverse Electric</i> (transversal elektrisch)
TESLA	<i>TeV-Energy Superconducting Linear Accelerator</i>
TM	<i>Transverse Magnetic</i> (transversal magnetisch)

# Literaturverzeichnis

- [1] K. ÅHLANDER, *Mesh Generation for Symmetrical Geometries*, in Computational Science and Its Applications - ICCSA 2005, O. Gervasi et al., ed., vol. 3480 of Lecture Notes in Computer Science, Springer Berlin / Heidelberg, 2005, pp. 657–668.
- [2] K. ÅHLANDER AND H. MUNTHE-KAAS, *On Applications of the Generalized Fourier Transform in Numerical Linear Algebra*, BIT Numerical Mathematics, 43 (2003), pp. 001–018.
- [3] —, *Eigenvalues for Equivariant Matrices*, Journal of Computational and Applied Mathematics, 192 (2006), pp. 89–99.
- [4] E. ALLGOWER, K. BÖHMER, K. GEORG, AND R. MIRANDA, *Exploiting Symmetry in Boundary Element Methods*, SIAM Journal on Numerical Analysis, 29 (1992), pp. 534 – 552.
- [5] E. ALLGOWER AND K. GEORG, *Exploiting Symmetry in BEM*. URL: [citeseer.ist.psu.edu/allgower96exploiting.html](http://citeseer.ist.psu.edu/allgower96exploiting.html), 1997.
- [6] —, *Numerical Exploitation of Symmetric Structures in BEM*. URL: [citeseer.ist.psu.edu/article/allgower97numerical.html](http://citeseer.ist.psu.edu/article/allgower97numerical.html), 1998.
- [7] —, *Numerical Exploitation of Symmetry in Integral Equations*. URL: [citeseer.ist.psu.edu/article/allgower98numerical.html](http://citeseer.ist.psu.edu/article/allgower98numerical.html), 1998.
- [8] E. ALLGOWER, K. GEORG, R. MIRANDA, AND J. TAUSCH, *Numerical Exploitation of Equivariance*. URL: [citeseer.ist.psu.edu/article/allgower97numerical.html](http://citeseer.ist.psu.edu/article/allgower97numerical.html), 1998.
- [9] E. ALLGOWER, K. GEORG, AND J. WALKER, *Exploiting Symmetry in 3D Boundary Element Methods*. URL: [citeseer.ist.psu.edu/277607.html](http://citeseer.ist.psu.edu/277607.html).
- [10] E. L. ALLGOWER AND K. GEORG, *Exploiting Symmetry in Numerical Solving*. URL: [citeseer.ist.psu.edu/allgower99exploiting.html](http://citeseer.ist.psu.edu/allgower99exploiting.html), 1999.
- [11] E. L. ALLGOWER, K. GEORG, AND R. MIRANDA, *Exploiting Permutation Symmetries with Fixed Points in Linear Equations*. URL: [citeseer.ist.psu.edu/allgower93exploiting.html](http://citeseer.ist.psu.edu/allgower93exploiting.html), 1993.
- [12] R. BALLISTI, C. HAFNER, AND P. LEUCHTMANN, *Application of the Representation Theory of Finite Groups to Field Computation Problems with Symmetrical Boundaries*, IEEE Transactions on Magnetics, 18 (1982), pp. 584–587.

- [13] M. BELGER AND L. EHRENBURG, *Theorie und Anwendung der Symmetriegruppen*, Verlag Harri Deutsch Thun und Frankfurt/M., 1981.
- [14] T. BETCKE, *Efficient Methods for Nonlinear Eigenvalue Problems*. Diploma Thesis, Technical University of Hamburg-Harburg, Department of Mathematics, 2003.
- [15] M. BONNET, *Exploiting Complete or Partial Geometrical Symmetry in Symmetric Galerkin BEM*, Electronic Journal of Boundary Elements, BETEQ 2001 (2002), pp. 340–347.
- [16] A. BOSSAVIT, *The Exploitation of Geometrical Symmetry in 3-D Eddy-Currents Computation*, IEEE Transactions on Magnetics, 21 (1985), pp. 2307–2309.
- [17] A. BOSSAVIT, *Symmetry, Groups and Boundary Value Problems. A Progressive Introduction to Noncommutative Harmonic Analysis of Partial Differential Equations in Domains with Geometrical Symmetry*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 56 (1986), pp. 167–215.
- [18] A. BOSSAVIT, *Boundary Value Problems with Symmetry and Their Approximation by Finite Elements*, SIAM Journal on Applied Mathematics, 53 (1993), pp. 1352–1380.
- [19] I. B. BOŽOVIĆ AND M. VUJIČIĆ, *Irreducible Representations of the Symmetry Groups of Polymer Molecules II*, Journal of Physics A: Mathematical and General, 14 (1981), pp. 777 – 795.
- [20] I. B. BOŽOVIĆ, M. VUJIČIĆ, AND F. HERBUT, *Irreducible Representations of the Symmetry Groups of Polymer Molecules I*, Journal of Physics A: Mathematical and General, 11 (1978), pp. 2133 – 2147.
- [21] R. BRINKMANN, K. FLÖTTMANN, AND J. ROSSBACH, *TESLA - Technical Design Report, Part II - The Accelerator*, TESLA Report 2001-23, DESY, 2001.
- [22] I. N. BRONSTEIN, K. A. SEMENDJAJEW, G. MUSIOL, AND H. MÜHLIG, *Taschenbuch der Mathematik*, Verlag Harri Deutsch Thun und Frankfurt/M., 2000.
- [23] A. BUFFA, M. COSTABEL, AND C. SCHWAB, *Boundary Element Methods for Maxwell's Equations on Non-Smooth Domains*, Numerische Mathematik, 92 (2002), pp. 679 – 710.
- [24] A. BUFFA AND R. HIPTMAIR, *Galerkin Boundary Element Methods for Electromagnetic Scattering*, in “Computational Methods in Wave Propagation”, M. Ainsworth et al., eds., Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Springer-Verlag, vol. 31, 2003, pp. 83 – 124.
- [25] W. BURNSIDE, *Theory of Groups of Finite Order*, Dover Publications, 2004.
- [26] C. COCKRELL AND F. BECK, *Asymptotic Waveform Evaluation (AWE) Technique for Frequency Domain Electromagnetic Analysis*, Technical Report: NASA-96-tm110292, NASA Langley Research Center, 1996.

- [27] D. COLTON AND R. KRESS, *Integral Equation Methods in Scattering Theory*, Krieger Publishing Company, Malabar, Florida, USA, 1992.
- [28] ———, *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1992.
- [29] G. R. COWPER, *Gaussian Quadrature Formulas for Triangles*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 7 (1973), pp. 405 – 408.
- [30] M. G. DUFFY, *Quadrature Over a Pyramid or Cube of Integrands with a Singularity at a Vertex*, SIAM Journal on Numerical Analysis, 19 (1982), pp. 1260 – 1262.
- [31] D. A. DUNAVANT, *High Degree Efficient Symmetrical Gaussian Quadrature Rules for the Triangle*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 21 (1985), pp. 1129 – 1148.
- [32] T. F. EIBERT, *Verknüpfung der Methode der Finiten Elemente mit einem Integralgleichungsverfahren für ebene geschichtete Strukturen*, PhD thesis, Bergische Universität/Gesamthochschule Wuppertal, 1997.
- [33] ———, *Numerische Berechnung von Streuproblemen*. Skriptum zur Vorlesung an der Technischen Universität Darmstadt, 2002.
- [34] T. F. EIBERT AND V. HANSEN, *On the Calculation of Potential Integrals for Linear Source Distributions on Triangular Domains*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 43 (1995), pp. 1499 – 1502.
- [35] T. EULER AND T. WEILAND, *Zur Effektivität von Radarreflektoren*, in Proceedings of the 11th Maritime Elektrotechnik, Elektronik und Informationstechnik (ME 2004), Juni 2004, pp. 123–126.
- [36] A. FÄSSLER, *Application of Group Theory to the Method of Finite Elements for Solving Boundary Value Problems*, dissertation, Zürich: ETH-Dissertation Nr. 5696, 1976.
- [37] K. GEORG AND R. MIRANDA, *Exploiting Symmetry in Solving Linear Equations*. URL: [citeseer.ist.psu.edu/georg92exploiting.html](http://citeseer.ist.psu.edu/georg92exploiting.html), 1992.
- [38] K. GEORG AND J. TAUSCH, *A Generalized Fourier Transform for Boundary Element Methods with Symmetries*. URL: [citeseer.ist.psu.edu/georg94generalized.html](http://citeseer.ist.psu.edu/georg94generalized.html), 1994.
- [39] M. A. GOLDBERG, *Boundary Integral Methods - Numerical and Mathematical Aspects*, Computational Mechanics Publications/WIT Press, 1999.
- [40] R. D. GRAGLIA, *On the Numerical Integration of the Linear Shape Functions Times the 3-D Green's Function or Its Gradient on a Plane Triangle*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 41 (1993), pp. 1448 – 1455.
- [41] R. D. GRAGLIA, G. LOMBARDI, D. R. WILTON, AND W. A. JOHNSON, *Modeling Edge Singularities in the Method of Moments*, Antennas and Propagation Society International Symposium, 2005 IEEE, 3A (2005), pp. 56 – 59.

- [42] L. GREENGARD AND V. ROKHLIN, *A Fast Algorithm for Particle Simulations*, Journal of Computational Physics, 73 (1987), pp. 325–348.
- [43] W. HACKBUSCH, *A Sparse Matrix Arithmetic Based on  $\mathcal{H}$ -Matrices. Part I: Introduction to  $\mathcal{H}$ -Matrices*, Computing, 62 (1999), pp. 89–108.
- [44] W. HACKBUSCH AND Z. P. NOWAK, *On the Fast Matrix Multiplication in the Boundary Element Method by Panel Clustering*, Numerische Mathematik, 54 (1989), pp. 463–491.
- [45] C. HAFNER, R. BALLISTI, AND P. LEUCHTMANN, *Gruppentheoretische Ausnützung von Symmetrien, Teil 2*, Scientia Electrica, 27 (1981), pp. 107–138.
- [46] C. HAFNER AND P. LEUCHTMANN, *Group and Representation Theory of Finite Groups and Its Application to Field Computation Problems with Symmetrical Boundaries*, Antennas and Propagation Society International Symposium, 1981, 19 (1981), pp. 546–548.
- [47] ———, *Gruppentheoretische Ausnützung von Symmetrien, Teil 1*, Scientia Electrica, 27 (1981), pp. 75–100.
- [48] M. HAMERMESH, *Group Theory and Its Application to Physical Problems*, Dover Publications, Inc. New York, 1962.
- [49] R. HARRINGTON, *Origin and Development of the Method of Moments for Field Computation*, IEEE Antennas and Propagation Magazine, 32 (1990), pp. 31 – 35.
- [50] R. F. HARRINGTON, *Time-Harmonic Electromagnetic Fields*, McGraw-Hill Book College, 1961.
- [51] ———, *Field Computation by Moment Methods*, The Macmillan Company, New York, USA, 1968.
- [52] H. HENKE, *Elektromagnetische Felder, Theorie und Anwendung*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2003.
- [53] T. HERZBERG, *Design von Beschleunigerkavitäten auf Basis der Randelementmethode*, Diplomarbeit, Technische Universität Darmstadt, Fachbereich Elektrotechnik und Informationstechnik, 2006.
- [54] G. C. HSIAO AND R. E. KLEINMANN, *Mathematical Foundations for Error Estimation in Numerical Solutions of Integral Equations in Electromagnetics*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 45 (1997), pp. 316 – 328.
- [55] ISO 8729:1997, *Ships and Marine Technology - Marine Radar Reflectors*.
- [56] J. D. JACKSON, *Klassische Elektrodynamik*, Walter de Gruyter, 2002.
- [57] E. JARLEBRING, *Krylov Methods for Nonlinear Eigenvalue Problems*, master’s thesis, Department of Numerical Analysis and Computer Science, Royal Institute of Technology, Stockholm, 2003.

- [58] P. K. KYTHE AND M. R. SCHAFERKOTTER, *Handbook of Computational Methods for Integration*, Chapman & Hall/CRC, 2005.
- [59] G. LEHNER, *Elektromagnetische Feldtheorie für Ingenieure und Physiker*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1994.
- [60] P. LEUCHTMANN, *Group Theoretical Symmetry Considerations by the Application of the Method of Images*, Archiv für Elektronik und Übertragungstechnik (AEÜ), 36 (1982), pp. 124–128.
- [61] J. LOBRY, *Use of Group Theory in Symmetrical 3-D Eddy-Current Problems*, IEE Proceedings - Science, Measurement and Technology, 143 (1996), pp. 369–376.
- [62] W. LUDWIG AND C. FALTER, *Symmetries in Physics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1988.
- [63] J. LYNESS, *A Survey of Numerical Cubature over Triangles*, Proceedings of Symposia in Applied Mathematics, 48 (1994), pp. 127–150.
- [64] A. MARTINET, C. SOLER, N. HOLZSCHUCH, AND F. X. SILLION, *Accurate Detection of Symmetries in 3D Shapes*, ACM Transactions on Graphics, 25 (2006), pp. 439–464.
- [65] K. MATHIAK AND P. STINGL, *Gruppentheorie für Chemiker, Physiko-Chemiker, Mineralogen*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften Berlin, 1969.
- [66] V. MEHRMANN AND H. VOSS, *Nonlinear Eigenvalue Problems: A Challenge for Modern Eigenvalue Methods*, GAMM Mitteilungen, 27 (2004), pp. 121 – 152.
- [67] J. MEIXNER, *The Behavior of Electromagnetic Fields at Edges*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 20 (1972), pp. 442 – 446.
- [68] H. MUNTKE-KAAS, *On Group Fourier Analysis and Symmetry Preserving Discretizations of PDEs*, Journal of Physics A: Mathematical and General, 39 (2006), pp. 5563–5584.
- [69] J. NICOLLE, *Die Symmetrie und ihre Anwendungen*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften Berlin, 1954.
- [70] M. I. PETRASCHEN AND E. D. TRIFONOW, *Anwendung der Gruppentheorie in der Quantenmechanik*, Akademie-Verlag Berlin, 1969.
- [71] M. J. D. POWELL, *The NEWUOA Software for Unconstrained Optimization without Derivatives*, Technical Report DAMTP 2004/NA08, Cambridge University Numerical Analysis Group, 2004.
- [72] S. M. RAO, D. R. WILTON, AND A. W. GLISSON, *Electromagnetic Scattering by Surfaces of Arbitrary Shape*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 30 (1982), pp. 409 – 418.

- [73] C. REDDY, M. DESHPANDE, C. COCKRELL, AND F. BECK, *Fast RCS Computation over a Frequency Band Using Method of Moments in Conjunction with Asymptotic Waveform Evaluation Technique*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 46 (1998), pp. 1229 – 1233.
- [74] D. ROCKMORE, *Some Applications of Generalized FFTs*. URL: [cite-seer.ist.psu.edu/rockmore97some.html](http://cite-seer.ist.psu.edu/rockmore97some.html), 1997.
- [75] E. J. ROTHWELL AND M. J. CLOUD, *Electromagnetics*, CRC Press, 2001.
- [76] T. K. SAKAR, *A Note on the Choice Weighting Functions in the Method of Moments*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 33 (1985), pp. 436 – 441.
- [77] S. SAUTER AND C. SCHWAB, *Randelementmethoden: Analyse, Numerik und Implementierung schneller Algorithmen*, B.G. Teubner Verlag Wiesbaden, 2004.
- [78] D. SIEVERS, T. F. EIBERT, AND V. HANSEN, *Correction to “On the Calculation of Potential Integrals for Linear Source Distributions on Triangular Domains”*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 53 (2005), pp. 3113 – 3113.
- [79] D. SIEVERS, I. A. ZAGORODNOV, AND T. WEILAND, *Anwendung finiter Symmetriegruppen zur Beschleunigung der numerischen Lösung von Streuproblemen*, FREQUENZ Zeitschrift für Telekommunikation, 58 (2004), pp. 259 – 268.
- [80] E. STIEFEL AND A. FÄSSLER, *Gruppentheoretische Methoden und ihre Anwendung*, B.G. Teubner Verlag Stuttgart, 1979.
- [81] J. STOER, *Numerische Mathematik 1*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2002.
- [82] K. SURESH AND A. SIRPOTDAR, *Automated Symmetry Exploitation in Engineering Analysis*, Engineering with Computers, 21 (2006), pp. 304–311.
- [83] C.-T. TAI, *Generalized Vector and Dyadic Analysis*, IEEE Computer Society Press, 1997.
- [84] —, *Direct Integration of Field Equations*, in “Progress In Electromagnetics Research”, PIER 28, 2000, pp. 339 – 359.
- [85] R. P. TARASOV, *Harmonic Analysis on Finite Groups and Methods for the Numerical Solution of Boundary Equations in Boundary Value Problems with a Non-Abelian Group of Symmetries*, Computational Mathematics and Mathematical Physics, 32 (1992), pp. 1515–1517.
- [86] —, *Numerical Solution of Convolution-Type Equations on Finite Noncommutative Groups*, Computational Mathematics and Mathematical Physics, 33 (1993), pp. 1815–1825.
- [87] R. P. TARASOV AND I. A. ZAGORODNOV, *Diffraction by a Perfectly Conducting Cube*, Journal of Communications Technology and Electronics, 44 (1999), pp. 380–389.



- [88] M. TASKINEN, *On the Implementation and Formulation of the Electromagnetic Surface Integral Equations*, PhD thesis, Electromagnetic Laboratory, Helsinki University of Technology, 2006.
- [89] J. TAUSCH, *Equivariant Preconditioners for Boundary Element Methods*, PhD thesis, Department of Mathematics, Colorado State University, 1995.
- [90] —, *Equivariant Preconditioners for Boundary Element Methods*, SIAM Journal on Scientific Computing, 17 (1996), pp. 90–99.
- [91] D. J. TAYLOR, *Accurate and Efficient Numerical Integration of Weakly Singular Integrals in Galerkin EFIE Solutions*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 51 (2003), pp. 1630 – 1637.
- [92] J. VAN BLADEL, *Singular Electromagnetic Fields and Sources*, IEEE Computer Society Press, 1995.
- [93] M. WAGNER, *Gruppentheoretische Methoden in der Physik*, Vieweg Verlag Braunschweig / Wiesbaden, 1998.
- [94] S. WEDNER, *Verifizierte Bestimmung singulärer Integrale - Quadratur und Kubatur*, Dissertation, Fakultät für Mathematik der Universität Karlsruhe (TH), 2000.
- [95] T. WEILAND, *A Discretisation Method for the Solution of Maxwell's Equations for Six-Component Fields*, Archiv für Elektrotechnik und Übertragungstechnik (AEÜ), 31 (1977), pp. 116–120.
- [96] T. WEILAND AND I. ZAGORODNOV, *Maxwell's Equations for Structures with Symmetries*, Journal of Computational Physics, 180 (2002), pp. 297–312.
- [97] D. WILTON, S. RAO, A. W. GLISSON, D. H. SCHAUBERT, O. M. AL-BUNDAK, AND C. M. BUTLER, *Potential Integrals for Uniform and Linear Source Distributions on Polygonal and Polyhedral Domains*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 32 (1984), pp. 276 – 281.
- [98] P. YLÄ-OIJALA AND M. TASKINEN, *Calculation of CFIE Impedance Matrix Elements with RWG and  $n \times$  RWG Functions*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 51 (2003), pp. 1837 – 1846.
- [99] I. A. ZAGORODNOV, Численные методы решения задач дифракции волн на структурах с группой симметрии куба, PhD thesis, Lomonosov Moscow State University, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics, 1998.
- [100] I. A. ZAGORODNOV, A. S. IL'INSKII, AND R. P. TARASOV, *Diffraction by a Dielectric Cube, a Dielectric Octahedron, and a Dielectric Hexoctahedron*, Journal of Communications Technology & Electronics, 46 (2001), pp. 383–392.
- [101] —, *Grid Boundary Equations on Conducting Surfaces with Symmetries and Their Numerical Analysis in Problems of Diffraction by a Sphere*, Computational Mathematics and Mathematical Physics, 41 (2001), pp. 712–738.

- 
- [102] I. A. ZAGORODNOV AND R. P. TARASOV, *The Problem of Scattering from Bodies with Noncommutative Finite Group of Symmetries and Its Numerical Solution*, Computational Mathematics and Mathematical Physics, 37 (1997), pp. 1206–1222.
- [103] —, *Numerical Solution of the Problems of Scattering by Platonic Bodies in the Classes of Functions Invariant under Symmetry Transformations*, Computational Mathematics and Mathematical Physics, 38 (1998), pp. 1247–1255.
- [104] —, *Boundary Integral Equations of the First and Second Kind for Numerical Solution of the Problem of Diffraction by Polyhedrons Near Interior Resonances*, Computational Mathematics and Mathematical Physics, 40 (2000), pp. 1456–1478.
- [105] —, *Finite Groups and a Numerical Solution to the Problems of the Theory of Wave Scattering*, Journal of Communications Technology and Electronics, 45 (2000), pp. 164–184.

# Lebenslauf



## Persönliche Daten

Name: Denis Sievers  
Geburtsdatum: 11.01.1974  
Geburtsort: Aschersleben

## Ausbildung / Werdegang

1980 – 1990	Besuch der 2. Polytechnischen Oberschule in Aschersleben
1990 – 1994	Ausbildung zum Industrieelektroniker bei der OPTIMA-Aschersleben Verpackungsmittel GmbH
1994 – 1995	Erwerb der Fachhochschulreife an der Fachoberschule „Technik“ in Hettstedt
1995 – 1996	Ableistung des Grundwehrdienstes
1996 – 2002	Studium der Elektrotechnik an der Universität-Gesamthochschule Siegen mit Schwerpunkt „Theoretische Elektrotechnik“
seit 2002	Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theorie Elektromagnetischer Felder der Technischen Universität Darmstadt

